



**Пета научна конференция за студенти, докторанти и
млади учени**

"Предизвикателства в Химията"

Пловдив 2019

Програма на конференцията

22 Ноември 2019 (петък)

08:30 - 09:30 РЕГИСТРАЦИЯ

09:30 - 10:00 ОТКРИВАНЕ, зала Компас, Ректорат

10:00 - 12:00 Пленарни доклади

- 10:00 - 10:40 **Веселин Тончев**, "Модел на кристален растеж без съпътстващо зародишообразуване"
- 10:40 - 11:20 **Мария Марудова**, "Полиелектролитни многослойни филми за контролирано освобождаване на лекарствени вещества"
- 11:20 - 12:00 **Нина Желязкова**, "Отворен код и отворени данни за приложения на химичната и нано-информатиката"

12:00 - 13:00 Обедна почивка

13:00 - 14:30 Устни Доклади

- 13:00 - 13:15 **Лидия Кайнарова**, "Тестване и валидиране на калибрационни стратегии при определяне на концентрация и размери на наночастици със spICP-MS"
- 13:15 - 13:30 **Селен Исмаил**, "Синтез и охарактеризиране на нови рН-чувствителни флуоресцентни полимерни мицели за биомедицинско приложение"
- 13:30 - 13:45 **Полина Джамбазова**, "Получаване и охарактеризиране на комплексни съединения на 2-тиоурацил и негови производни"
- 13:45 - 14:00 **Николай Лумов**, "Изследване на структура и механизъм на радикал улавяне на N-алкилирани бензимидазолови продукти чрез теоретични методи"
- 14:00 - 14:15 **Илкнур Ахмед**, "Синтез на нови фироцен-съдържащи хетероциклени съединения"
- 14:15 - 14:30 **Ирена Костова**, "Регионална мрежа за мониторинг на въздуха"

14:30 - 15:30 Постерна сесия

15:30 - 17:00 Устни доклади

- 15:30 - 15:45 **Десислава Киркова**, "Синтез на нови бензотиазолови производни – потенциални тирозиназни инхибитори"
- 15:45 - 16:00 **Мария Аргирова**, "Идентификация на органични материали в художествени творби чрез комбинирани аналитични методи"
- 16:00 - 16:15 **Глория Исса**, "Синтез на нови наноструктурирани манган-цериеви катализатори за пълно окисление на етилацетат"
- 16:15 - 16:30 **Десислава Гергинова**, "Пчелен мед – как да разпознаем истинския, използвайки ЯМР спектроскопия"
- 16:30 - 16:45 **Nina Stoyanova**, "Viral DNA polymerase inhibition by Graptopetalum paraguayense phenolic acids. A theoretical study"
- 16:45 - 17:00 **София Славова**, "Образуване на пиримидиновите бази цитозин и урацил от формамид"

17:30 Коктейл

23 Ноември 2019 (събота)

10:30 - 13:00 Работни срещи по направления

13:00 - 14:00 Обяд

14:30 - 17:00 Културна програма

VIRAL DNA POLYMERASE INHIBITION BY *GRAPTOPETALUM PARAGUAYENSE* PHENOLIC ACIDS. A THEORETICAL STUDY

Nina Stoyanova¹, Miroslav Rangelov², Petia Genova-Kalu³, Venelin Enchev¹,
Nadezhda Markova²

¹*Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria;* ²*Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria;* ³*National Reference Laboratory "Rickettsia and Tissue Cultures", Department of Virology, National Centre of Infectious and Parasitic Diseases, Sofia, Bulgaria*

Viral diseases are the primary cause of death among human infectious diseases worldwide. Herpesviridae is a large family of DNA-containing viruses that result in human infections to varying extents. There are two types of herpes simplex virus, type 1 and type 2 (HSV-1 and HSV-2). Common therapies for herpes infections employ nucleoside analogs, such as Acyclovir, and target the viral DNA polymerase, essential for viral DNA replication. Systemic application of these agents is often limited by the development of drug-resistance or toxicity, especially in immunosuppressed patients. A better understanding of the herpes virus replication will help the development of new safe and effective broad-spectrum anti-herpetic drugs that fill an unmet need. Recently we found that the total methanol extract from succulent plant *Graptopetalum paraguayense* E. Walther (GP) demonstrates a significant inhibitory effect on HSV-1, especially the GP phenolic fraction. Since virus-encoded DNA polymerase appears to be a key feature in the replication of large DNA viruses such as HSV, we present theoretical investigations on the binding expedient of phenolic acids from this fraction to viral DNA polymerase amino acids. Twelve different phenolic acids such as gallic acid, *trans*-ferulic acid, syringic acid, and others were found By GS/MS analyses.

MOE 2016 software package was used to dock selected structures in the active site defined in published XRD (X-ray diffraction) structures of the Herpes Simplex Virus 1 DNA Polymerase. The structure was protonated according to implemented Protonate3D algorithm and was scored according to implemented GBVI/WSA dG scoring function. According to this scoring function, *trans*-ferulic acid and gentisic acid have optimal interactions with the receptor.

From the results based on the molecular docking methods, we have modeled some hydrogen-bonded complexes between phenolic and amino acids. The received data from our quantum-chemical calculations suggest that all phenolic acids could form stable complexes with amino acids from the DNA polymerase active site. The calculations were performed at B3LYP/6-31+G(d,p) level of theory using GAUSSIAN 09 software package.