

XVII НАЦИОНАЛНА КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИЯ ЗА СТУДЕНТИ И ДОКТОРАНТИ

16-18 май 2018 г.



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

ИЗЯСНЯВАНЕ АФИНИТЕТА НА 2-КАРБАМИДО-1,3-ИНДАНДИОН КЪМ НУКЛЕОТИДИТЕ НА ДНК И РНК СЪДЪРЖАЩИ КЛЕТЪЧНИ СТРУКТУРИ

Нина Стоянова¹, Надежда Маркова¹, Петя Генова-Калу²,
Венелин Енчев¹

¹ БАН, ИОХЦФ, ул. акад. Г. Бончев, бл. 9, София 1113, stoyanova@orgchm.bas.bg

² НЦЗПБ-София, бул. Янко Сакъзов 26, София 1504, petia.d.genova@abv.bg

2-Заместените производни на 1-3-индандиона намират широко приложение в областта на медицината и биологията. Производните на 2-карбамидо-1,3-индандион (CAID) имат потенциал като антинеопластични средства ^[1,2], а самият CAID, като биомаркер ^[3,4].

От флуоресцентно-микроскопски анализ на 2-карбоксамид-индан-1,3-дион в Balb/c 3T3 клетъчни линии, е определена цитотоксичността, способността му да прониква през клетъчни мембрани и е изследвана клетъчната му локализация ^[4]. Данните от флуоресцентната микроскопия сочат, че CAID прониква в клетъчните структури съдържащи ДНК и РНК, като ядро и ядърце. *In vitro* анти туморната активност на съединението е определена върху различни клетъчни линии, като CAID показва добри антинеопластични свойства.

За да се изясни афинитета на CAID към нуклеинови киселини са направени квантово химични B3LYP/6-31+G(d,p) изчисления. Разгледани са два начина за свързване на CAID (към азотната база и към фосфатната група) към петте нуклеотида съдържащи се в ДНК и РНК. Пресметнати са енергиите на взаимодействие на формираните комплекси, за да се оцени има ли приоритетно свързване на CAID към даден нуклеотид. Намерено е, че 2-карбоксамид-индан-1,3-дион се свързва преимуществено към фосфатната група в гуанозинмонофосфата.

[1] Dimmock JR., Pati HN, *Arch. Pharm. (Weinheim)* **2010**, DOI 0.1002/ardp.200900308.

[2] I. Hall, O. Wong, L. Chi, S. Chen, *Anticancer Res.* **1994**, *14*, 2053—2058.

[3] V. Enchev, I. Angelov, V. Mantareva, N. Markova, *J. Fluoresc.* **2015**, *25*, 1601–1614.

[4] N. Markova, A. Georgieva, I. Philipova, I. Angelov, V. Enchev, A. Kril, *Bulg. Chem. Commun.* **2017**, *49*, 221–226.

XVII Национална конференция по химия за студенти и докторанти

Програма на конференцията

16 май 2017

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

10:30 12:30 **Откриване**

Лекция на проф. Радка Аргирова, Болница Токуда, София
А. Хинков, А. Павлов, В. Атанасов, Р. Аргирова

„Изследване на новосинтезирани стирилхинолини за анти-HIV-1 активност в клетъчна култура“

130 аудитория, Факултет по химия и фармация на СУ

12:30 13:40 Обедна почивка

Заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция Биохимия

13:40 14:00 Мария Лазарова Гаралова

„Биохимични маркери при сърдечна недостатъчност“

14:00 14:20 Яна Горанова, Иван Съмналиев, Силвия Стойкова, Васил Н. Атанасов

„In vivo изследване на невротоксичността на токсина випоксин изолиран от отровата на българската пепелянка“

Секция Аналитична химия

14:20 14:40 Александър Иванов, Силвия Стойкова, Иво Иванов, Васил Атанасов

„Количествено определяне на силденафил, тадалафил и аванафил в биологични матрици“

14:40 15:00 Мелвин Кременлисва, Елисавета Младенова, Ралица Балканска, Росица Шумкова

„Български дъбов и иглолистен манов мед – сравнително разглеждане“

15:00 15:20 **Кафе-пауза**

Секция Фармацевтична химия

15:20 15:40 Андрей Попатанасов, Любка Танчева

„Някои благоприятни ефекти на ванилина върху афективното поведение при модел на болестта на Паркинсон“

15:40 16:00 Надежда Ангелова, Георги Йорданов

„Синтез и физикохимично охарактеризиране на наночастици от желязен (III) хидроксифосфат и потенциалното им приложение като ваксинални адюванти“

Секция Полимери

16:00 16:20 Катя Каменова, Еми Халаджова, Петър Петров

„Смесени полимерни мицели за контролирано доставяне на инсулин“

16:20 16:40 Деница Николова, Марин Симеонов, Елена Василева

„Полиелектролитни комплекси като лекарство-доставящи системи“

16:40 17:00 Кристина Чимева, Антон Апостолов, Марин Симеонов, Румен Томов, Васант Кумар, Елена Василева, Стоян Смуков

„Полимерни мрежи като гелни електролити“

17 май 2017, заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция Инженерна химия и химични технологии

09:00 09:20 Иво Ганчев

„Биологична активност на щамове *Lactobacillus*“

09:20 09:40 Петра Добрева, Захари Винаров, Славка Чолакова

„Подобряване разтворимостта на прогестерон: ефект на молекулната структура на сърфактанта“

09:40 10:00 Габриела Ганчева, Владимир Кътев, Захари Винаров, Славка Чолакова

„Ефективна солюбилизация на Албендазол в агрегати на анионни сърфактанти“

10:00 10:20 Владимир Кътев, Захари Винаров, Деница Радева, Славка Чолакова, Николай Денков „Солюбилизация на хидрофобни лекарства: Ефект на структурата на ПАВ и на солюбилизираното вещество“

10:20 10:40 **Кафе-пауза**

17:20 17:40 Христина Лазарова, Маргарита Попова
„Естерификация на леволинова киселина върху сулфатирани ZrO_2 наночастици“

18 май 2017, заседателна зала на ФХФ, СУ

Секция Изчислителна химия

09:00 09:20 Кристина Симеонова, Петко Петков, Георги Вайсеров
„Квантово-химично моделиране на нитрозилини комплекси на преходни метални йони в зеолити“

09:20 09:40 Николай Даскалов, Петко Петков, Георги Вайсеров
„Молекулно динамично изследване на взаимодействия между доксорубини и алгинатни олигомери“

09:40 10:00 Николета М. Кирчева, Тодор М. Дудев
„Теоретично изследване на абиогенни йони с терапевтичен ефект“

10:00 10:20 Николай Тошев, Диана Чешмеджиева, Тодор М. Дудев
„Фактори, определящи металния афинитет и селективност на функционализирани със сяра и селен инхибитори на хистон деацетилазата с потенциално приложение в клиничната практика“

10:20 10:40 Кафе-пауза

10:40 11:00 Йоанна Стойчева, Юлия Романова, Аля Таджер, Артур Ненов
„Бор-дотирането, или как да повишим ефективността на органичните фотоволтаични клетки“

11:00 11:20 Гергана Гочева, Стоян Илиев, Николета Иванова, Жасмина Петрова, Галя Маджарова, Анела Иванова
„Взаимодействие на фолиева киселина и антифолати с фолатен рецептор вграден в моделна клетъчна мембрана“

11:20 11:40 Борис Борисов, Пенчо Бейков, Ивелина Георгиева, Цветан Захариев
„Молекулно моделиране на луминесцентни свойства на комплекси на европий(III) и тербий(III)“

11:40 12:00 Нина Стоянова, Надежда Маркова, Петя Генова-Калу, Венелин Енчев
„Изясняване афинитета на 2-карбамидо-1,3-индандион към нуклеотидите на ДНК и РНК съдържащи клетъчни структури“

12:00 13:20 Обедна почивка

Секция Органична химия

13:20 13:40 Весела Михайлова, Донка Ташева, Нели Матеева

„Синтез на 3,5-диарилзаместени пиридин-2-карбонитрили“

13:40 14:00 Александър Костадинов, Ана Колева, Невена Петкова, Росица Николова

„Получаване на 4,4'-димери на 3-заместени кумарини – условия, механизъм и ограничения на метода.“

14:00 14:20 Христо Манов, Станислава Йорданова, Станимир Стоянов, Иво Грабчев

„Синтез, спектрални свойства и микробиологична активност на нов трипод на база 1,8-нафталимид“

14:20 14:40 Силвия Христова

„Дизайн на роторни превключватели: проблеми и перспективи“

14:40 15:00 Десислава Гергинова, Явор Митрев, Светлана Симова

„Ботанически произход на български пчелен мед посредством ЯМР спектроскопия“

15:00 15:20 Кафе-пауза

Секция Фитохимия и фармакогнозия

15:20 15:40 Деспина Балодима, Димитрина Желева-Димитрова, Ренета Гевренова

„GOTCAB сапонини от корените на *Gypsophila glomerata* (Caryophyllaceae)“

15:40 16:00 Венелина Ангелкова, Иван Свињаров, Анели Неделчева, Милен Богданов

„Радикалоулавяща и антиоксидантна активност на *Prunella vulgaris* L. – Сравнително изследване на различни хабитати“