

CONTENTS

Editorial	372
<i>I. Binev, A. Popova</i> , Ivan Nikolov Juchnovski – Biographical and professional data	373
<i>I. B. Blagoeva, E. P. Ignatova-Avramova, A. H. Koedjikov, I. G. Pojarlieff, L. I. Proevska, V. T. Rachina, N. G. Vassilev</i> , Linear free energy relationships of the <i>gem</i> -dimethyl (<i>gem</i> -dialkyl) effect	386
<i>M. D. Marinova, B. P. Tchorbanov</i> , Brassicaceae plants as a new source of food grade peptidases	397
<i>S. Ilieva, Y. Atanasov, B. Galabov</i> , Mechanism of the aminolysis of phenyl acetate: a computational study	401
<i>S. P. Simeonov, V. B. Kurteva, R. P. Bontchev</i> , One-pot solvent-free synthesis of symmetrical azines under microwave irradiation	409
<i>Y. Dimitrova</i> , Hydrogen bonding in ionic systems of 1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-ene (TBD) with 4-cyanophenol: <i>ab initio</i> and DFT studies of their structures	418
<i>L. I. Daskalova, Y. Dimitrova</i> , Theoretical study of structures and stability of hydrogen-bonded systems between pyridine-3-carboxamide (nicotinamide) and DMSO	426
<i>E. A. Velcheva, P. J. Vassileva-Boyadjieva, I. G. Binev</i> , Experimental and DFT studies on IR spectral and structural changes arising from the conversion of 1H-indole-2,3-dione (isatin) into azanion	433
<i>D. I. Ivanova, I. I. Timtcheva, B. A. Stamboliyska, D. I. Batovska</i> , UV-VIS absorption and fluorescent characteristics of some substituted in the styryl fragment synthetic chalcones	440
<i>B. A. Stamboliyska, A. D. Popova, E. A. Velcheva</i> , Theoretical study of the conformational preference of N-[(4-aminophenyl) sulphonyl]acetamide (sulphacetamide) and its azanion	445
<i>S. M. Bakalova, J. Kaneti, O. Castaño</i> , Computational study of the electronic spectra of some B–N dyes	450
<i>B. B. Koleva</i> , Solid-state IR-LD spectroscopy of L-tryptophan-containing dipeptides L-tryptophyl-L-methionine (<i>H-Trp-Met-OH</i>), L-methionyl-L-tryptophan (<i>H-Met-Trp-OH</i>) and glycyl-L-tryptophan dihydrate (<i>H-Gly-Trp-OH.2H₂O</i>)	456
<i>G. I. Ivanova, E. J. Cabrita, R. O'Connor, A. J. Eustace, D. F. Brougham</i> , Application of diffusion-ordered spectroscopy for the analysis of cancer related biological samples	464
<i>M. G. Spasova, D. P. Paneva, N. E. Manolova, I. B. Rashkov</i> , Preparation of novel chitosan-containing micro- and nanofibrous materials by electrospinning	469
<i>E. D. Cherneva, Ts. M. Kolev</i> , Solid-state polarized IR-spectroscopic study of high temperature red phase of 5-amino-2-methoxypyridine ester amide of squaric acid ethyl ester	477
<i>Ts. D. Tsanev, Ts. M. Kolev</i> , Spectroscopic elucidation of hydrogensquarate and ester amide of squaric acid of 2-chloro-3-aminopyridine	483
<i>O. Stoilova, H. Penchev, T. Ruskov, I. Spirov, N. Manolova, I. Rashkov</i> , One-pot preparation of magnetic chitosan beads	491
<i>B. A. Stamboliyska, D. Y. Yancheva, Ts. M. Kolev</i> , A theoretical investigation on the structure, electronic spectra and nonlinear optical properties of pyridinium-betaines of squaric acid	498
<i>M. I. Kotev, P. M. Ivanov</i> , Molecular mechanics (MM3(π)) conformational analysis of molecules containing conjugated π -electron fragments: a molecular tweezer	505
<i>A. D. Popova, Y. I. Binev, P. J. Vassileva-Boyadjieva, I. G. Binev</i> , Experimental IR, and computational <i>ab initio</i> and DFT B3LYP studies on spectral and structural changes, caused by the conversion of methyl cyanoacetate into carbanion	512
<i>J. A. Tsenov, S. S. Stoyanov, I. G. Binev</i> , IR spectral and structural changes, caused by the conversion of 4-cyanobenzamide into azanion: a combined experimental/computational approach	520
<i>N. G. Vassilev</i> , <i>Ab initio</i> SCF study of the barrier to internal rotation in N,N-dimethylcinnamamides ..	526
<i>V. Enchev, S. Angelova, N. Markova, I. Wawer, E. Stanoeva, M. Mitewa</i> , <i>Ab initio</i> and DFT study of the structure of metal ion complexes with N-benzalaniline-15-crown-5	532
<i>S. S. Stoyanov, A. D. Popova, J. A. Tsenov</i> , IR Spectra and structure of 3,5,5-trimethyl(cyclohex-2-enylidene) malononitrile and its potassium cyanide and sodium methoxide carbanionic adducts: experimental and B3LYP studies	538
	595

<i>V. D. Kancheva, V. S. Bankova</i> , Chain-breaking antioxidant activity of two new chalcones from propolis of El Salvador in homogeneous and micellar media	546
<i>P. N. Penchev, V. L. Miteva, A. N. Sohov, N. T. Kochev, G. N. Andreev</i> , Implementation and testing of routine procedure for mixture analysis by search in infrared spectral library	556
<i>M. Kratchanova, M. Gocheva, E. Pavlova, I. Yanakieva, D. Nedelcheva, V. Kussovski, A. Slavov</i> , Characteristics of pectic polysaccharides from leek obtained through consecutive extraction with various reaction agents	561
<i>Tz. Gospodova, J. R. Rashkova, L. Z. Viteva</i> , Stereocontrolled intramolecular cyclization of <i>anti</i> - β -aminonitriles. Convenient access to <i>trans</i> -azetidin-2-imines	568
Author Index	572
Subject Index	576

СЪДЪРЖАНИЕ

<i>И. Б. Благоева, Ел. П. Игнатова-Аврамова, Ас. Х. Коеджиков, Ив. Г. Пожарлиев, Л. И. Проевска, В. Т. Рачина, Н. Г. Василев</i> , Линейни зависимости на свободните енергии на гем-диметил ефекта (гем-диалкил ефекта)	396
<i>М. Д. Маринова, Б. П. Чорбанов</i> , Растенията от сем. <i>Brassicaceae</i> като източник на хранителни пептидази	400
<i>С. Илиева, Я. Атанасов, Б. Гълъбов</i> , Теоретично изследване на механизма на аминоклизата на фенилацетат	408
<i>Св. Симеонов, В. Б. Куртева, Р. П. Бончев</i> , Едностадийн синтез на симетрични азини под действие на микровълни в отсъствие на разтворители	417
<i>Й. Димитрова</i> , Водородно свързване в йонни системи на 1,5,7-триазабицикло[4.4.0]дец-5-ен с 4-цианофенол. Изследвания на структурите им с методите <i>ab initio</i> и ТФП	425
<i>Л. Ив. Даскалова, Й. Димитрова</i> , Теоретично изследване на структури и стабилност на водородно-свързани системи между пиридин-3-карбоксамид (никотинамид) и ДМСО	432
<i>Ев. А. Велчева, П. Ж. Василева-Бояджиева, Ив. Г. Бинев</i> , Експериментално и ТФП изследване на ИЧ спектрални и структурни промени произтичащи от превръщането на 1Н-индол-2,3-дион (изатин) в азанион	439
<i>Д. И. Иванова, Ил. И. Тимчева, Б. А. Стамболийска, Д. И. Бътовска</i> , Абсорбционни и флуоресцентни характеристики в УВ-видимата област на някои заместени в стирилния фрагмент синтетични халкони	444
<i>Б. А. Стамболийска, А. Д. Попова, Е. А. Велчева</i> , Теоретично изследване на конформационните предпочитания на N-[(4-аминофенил)сулфонил]ацетамид (сулфацетамид) и неговия азанион	449
<i>Сн. М. Бакалова, Х. Ян. Канети, Об. Д. Кастаньо</i> , Изчислително моделиране на електронните спектри на някои багрила, съдържащи връзката В–N	455
<i>Б. Б. Колева</i> , Твърдотелна линейно-дихроична ИЧ спектроскопия на L-триптофан-съдържащи дипептиди L-триптофил-L-метионин (<i>H-Trp-Met-OH</i>), L-метионил-L-триптофан (<i>H-Met-Trp-OH</i>) и глицил-L-триптофан дихидрат (<i>H-Gly-Trp-OH.2H₂O</i>)	463
<i>Г. Ив. Иванова, Еур. Ж. Кабрита, Р. О'Конор, Ал. Дж. Юстасе, Д. Ф. Броухам</i> , Приложение на дифузионно подредена спектроскопия за анализ на ракови биологични проби	468
<i>М. Г. Спасова, Д. П. Панева, Н. Ем. Манолова, Ил. Б. Рашков</i> , Получаване на нови хитозан-съдържащи микро- и нановлакнести материали чрез електроовлажняване	476
<i>Е. Д. Чернева, Ц. М. Колев</i> , Поларизационно ИЧ-спектрално изследване на високотемпературната “червена” фаза на 5-амино-2-метоксипиридин естер amid на етиловия естер на квадратната киселина	482
<i>Ц. Цанев, Ц. М. Колев</i> , Спектрално охарактеризиране на хидрогенскварат и естер amid на квадратната киселина с 2-хлор-3-аминопиридин	490
<i>О. Стоилова, Хр. Пенчев, Т. Русков, Ив. Спиров, Н. Манолова, Ил. Рашков</i> , Едноетапно получаване на магнитни хитозанови сфери	497
<i>Б. А. Стамболийска, Д. Я. Янчева, Ц. М. Колев</i> , Теоретично изследване на структурата, електронните спектри и нелинейните оптични свойства на пиридин-бетаините на квадратната киселина	504
<i>М. И. Котев, П. М. Иванов</i> , Молекулно-механичен (ММ3(π)) конформационен анализ на молекули съдържащи спрегнати π-електронни фрагменти: молекулна пинсета	511
<i>Ан. Д. Попова, Юр. Ив. Бинев, П. Ж. Василева-Бояджиева, Ив. Г. Бинев</i> , Експериментални ИЧ и теоретични <i>ab initio</i> ХФ и ТФП ВЗЛУР изследвания на спектралните и структурните промени, причинени от превръщането на метилцианоацетата в карбанион	519
<i>Й. Ан. Ценов, С. С. Стоянов, Ив. Г. Бинев</i> , ИЧ-спектрални и структурни промени, породени от превръщането на 4-цианобензамид в азанион. Комбиниран експериментално-теоретичен подход	525
<i>Н. Г. Василев</i> , <i>Ab initio</i> SCF изследване на бариера на вътрешна ротация в N,N-диметилканелени амиди	531

<i>В. Енчев, С. Ангелова, Н. Маркова, Ив. Вавер, Ел. Станоева, М. Митева</i> , Изследване с методите <i>ab initio</i> и ТФП на структурата на комплекси на N-бензаланилин-15-краун-5 с метални йони	537
<i>С. С. Стоянов, Анг. Д. Попова, Й. Ан. Ценов</i> , ИЧ спектри и структура на 3,5,5-триметил(циклохекс-2-енилиден) малононитрил и неговите калиево-цианидни и натриево-метоксидни карбанионни адукти. Експериментално и ВЗЛУР изследване	545
<i>В. Д. Кънчева, В. С. Банкова</i> , Прекъсваща веригите антиоксидантна активност на нови халкони от прополис от Ел Салвадор в хомогенна и мицеларна среда	555
<i>П. Н. Пенчев, В. Л. Митева, А. Н. Сохоу, Н. Т. Кочев, Г. Н. Андреев</i> , Реализиране и проверка на рутинна процедура за анализ на смеси с помощта на библиотека от инфрачервени спектри	560
<i>М. Крачанова, М. Гочева, Е. Павлова, Ир. Янакиева, Д. Неделчева, В. Късовски, А. Славов</i> , Характеризиране на пектинови полизахариди от праз получени чрез последователно екстрахиране с различни реагенти	567
<i>Цв. Сп. Господова, Ж. Р. Раикова, Л. Зл. Витева</i> , Стереоконтролирана вътрешномолекулна циклизация на <i>анти</i> - β -амино-нитрили. Удобна синтеза на <i>транс</i> -азетидин-2-имини	571
Авторен указател	583
Предметен указател	587