

CONTENTS

Preface	5
Scientific biography of Professor DSc Tsonko Mitev Kolev.....	6
<i>V. B. Delchev</i> , Neutral versus protonated uracil: CASPT2 theoretical study of the mechanisms of NH-photodissociation	11
<i>Gergana Koleva, Boris Galabov</i> , Predicting molecular properties using theoretical parameters: substituted pyridines	17
<i>D. Staneva, E. Vasileva-Tonkova, I. Grabchev</i> , New fluorescent PAMAM dendron with sensor and microbiological activity.....	23
<i>A. A. Vasilev, M. I. Kandinska, Y. Zagranyski, D. Sucunza, J. J. Vaquero, O. D. Castaño, S. E. Angelova</i> , Novel asymmetric azaquinolizinium monomethine cyanine dyes versus a Thiazole Orange analog: a comparison of photophysical and dsDNA binding properties	32
<i>G. Stavrakov, I. Philipova, A. Lukarski, I. Valkova, M. Atanasova, I. Dimitrov, S. Konstantinov, I. Doytchinova</i> , Acetylcholinesterase inhibitors selected by docking-based screening – proof-of-concept study	40
<i>Y. L. Lazarova, T. M. Dodevska</i> , Rhodium-modified carbonaceous electrodes: application to electrochemical sensing of hydrogen peroxide	49
<i>N. Kircheva, T. Dudev</i> , Mechanism of therapeutic action of abiogenic Li ⁺ and Ga ³⁺ ions: insights from theoretical studies	55
<i>Ts. Stanimirova, Z. Delcheva, N. Petrova</i> , New phase obtained at mutual transformations of zinc hydroxy-salts	63
<i>V. Dyulgerov, Hr. Sbirikova-Dimitrova, L. Tsvetanova, R. Rusev, Boris Shivachev</i> , A new polymorph of Bisacodyl.....	73
<i>R. Rusev, L. Tsvetanova, B. Shivachev, K. Kossev, R. Nikolova</i> , Ureates and hydrates of magnesium chloride, nitrate and tetrafluoroborate.....	79
<i>G. Kirov¹, N. Petrova, Ts. Stanimirova</i> , Auto-freeze drying by zeolites	90
<i>R. Ilieva, E. Dyulgerova, O. Petrov, M. Tarassov, A. Gusiyska, R. Vasileva</i> , Preparation of hydroxyapatite/hyaluronan biomimetic nano-hybrid material for reconstruction of critical size bone defects	97
<i>R. W. Seidel, S. Zareva</i> , The crystal structures of L-leucinium hydrogensquarate monohydrate and DL-leucinium hydrogensquarate.....	106
<i>L. T. Dimova, I. Piroeva, S. Atanasova-Vladimirova, R. Rusev, B. L. Shivachev</i> , Structural peculiarities of natural chabazite modified by ZnCl ₂ and NiCl ₂	114
<i>S. Y. Zareva, G. G. Gencheva</i> , Crystal structure and spectral study of 3-methylpyridazinium hydrogensquarate.....	123
<i>S. Angelova, V. Nikolova, T. Dudev</i> , Divalent metal ions binding to lactose: a DFT computational study	130
<i>K. L. Kostov, E. Belamie, B. Alonso, T. Mineva</i> , Surface chemical states of cellulose, chitin and chitosan studied by density functional theory and high-resolution photoelectron spectroscopy	135
<i>S. Stoyanov, E. Velcheva, B. Stamboliyska</i> , IR spectral and structural changes caused by the conversion of salophen into oxyanion and dianion.....	147
<i>M. Todorova, R. Bakalska</i> , Syntheses and vibrational spectroscopic characteristics of series ionic merocyanine dyes.....	156
<i>T. R. Stankova, G. T. Delcheva, K. I. Stefanova, A. I. Maneva, S. V. Vladeva, G. A. Tsvetkova</i> , 3-nitrotyrosine as a serum biomarker of nitroxidative stress and insulin resistance in nascent metabolic syndrome	165
<i>N. Danchova, D. Paskalev, S. Gutzov</i> , Aerogels – new materials with promising applications.....	172

<i>M. I. Kandinska, A. A. Vasilev, V. S. Videva, S. E. Angelova</i> , A novel monomeric asymmetric tricationic monomethine cyanine dye – Thiazole Orange (TO) analog: synthesis, photophysical and dsDNA binding properties.....	178
<i>V. Mantareva, M. Aliosman, M. Durmuş, I. Angelov</i> , Amino acids substituted phthalocyanine complexes: an overview on the synthetic approaches and UV-vis properties related to photodynamic applications.....	185
<i>Y. Ilieva, Z. Kokanova-Nedialkova, P. Nedialkov, G. Momekov</i> , <i>In silico</i> ADME and drug-likeness evaluation of a series of cytotoxic polyprenylated acylphloroglucinols, isolated from <i>Hypericum annulatum</i> Morris subsp. <i>annulatum</i>	193
<i>S. S. Dimova, K. L. Zaharieva, F. S. Ublekov, H. P. Penchev</i> , Performance of metathesis reactions using different nano-sized ferrite-type catalysts.....	200
<i>R. Nikolova, Sl. Mankov, N. Petrova, R. Titorenkova</i> , Fluorwavellite from Petroshtitsa river valley, Republic of Macedonia.....	208
<i>M. Staneva, I. Radev, F. Ublekov, D. Budurova, V. Sinigersky, H. Penchev</i> , Proton conductive PBI membranes, containing cross-linked polyvinylsulfonic acid, for PEM fuel cells.....	215
<i>K. L. Zaharieva, K. I. Milenova, S. S. Dimova, S. V. Vassilev, I. D. Stambolova, V. N. Blaskov</i> , Effect of synthesis conditions on the photocatalytic efficiency of NiMnO ₃ /Mn ₂ O ₃ , NiMn ₂ O ₄ /NiMnO ₃ /Mn ₂ O ₃ and Ni ₆ MnO ₈ /NiMnO ₃ /Mn ₂ O ₃ for the degradation of Malachite Green dye under UV-light.....	222
<i>D. Cheshmedzhieva, N. Toshev, M. Gerova, O. Petrov, T. Dudev</i> , Sulfur and selenium derivatives of suberoyl anilide hydroxamic acid (SAHA) as a plausible HDAC inhibitors: a DFT study of their tautomerism and metal affinity/selectivity.....	228
<i>E. Cherneva, R. Buyukliev, N. Burdjiev, R. Michailova, A. Bakalova</i> , Pd(II) and Pd(IV) complexes with new hydantoin based ligand. Synthesis, characterization, computational and pharmacological studies.....	237
<i>J. Kaneti, S. M. Bakalova, I. P. Angelov</i> , Insights in the photophysics of 2-[2'-hydroxyphenyl]-quinazolin-4-one isomers by DFT modeling in the ground S ₀ and excited S ₁ states.....	243
<i>Zh. V. Georgieva, A. G. Ugrinov, R. P. Nikolova, B. L. Shivachev, S. Y. Zareva, S. G. Varbanov, T. D. Tosheva, G. G. Gencheva</i> , Coordination of bis((dimethylphosphinyl)methyl)amine to copper(II). Synthesis and single-crystal structure of its mononuclear octahedral copper(II) complex.....	251
<i>S. Kotov, H. Mayer-Figge, S. Zareva</i> , 4-Methylquinolinium hydrogensquarate – crystal structure and spectroscopic elucidation.....	260
<i>M. P. Tarassov, E. D. Tarassova</i> , Structural and chemical evolution of mineral forms of tungsten in the oxidation zone of the Grantcharitza deposit (Western Rhodopes, Bulgaria).....	270
<i>INSTRUCTIONS TO THE AUTHORS</i>	281

СЪДЪРЖАНИЕ

Предговор	5
Научна биография на проф. дн Цонко Митев Колев	6
<i>В. Б. Делчев</i> , Неутрален или протониран урацил: CASPT2 теоретично изследване на механизмите на NH-фотодисоциация.....	16
<i>Г. Колева, Б. Гълъбов</i> , Предсказване на молекулни свойства с помощта на теоретични параметри: заместени пиридили.....	22
<i>Д. Станева, Е. Василева-Тонкова, И. Грабчев</i> , Нов флуоресцентен ПАМАМ дендрон със сензорна и микробиологична активност	31
<i>А. А. Василев, М. И. Къндинска, Ю. Загранярски, Д. Сукунза, Х. Х. Вакеро, О. Д. Кастаньо, С. Е. Ангелова</i> , Сравняване на фотофизичните и ДНК-свързващи свойства на нови асиметрични азахинолизиниеви монометинови цианинови багрила с нов аналог на Тиазол Оранжев.....	39
<i>Г. Ставраков, И. Филипова, А. Лукарски, И. Вълкова, М. Атанасова, И. Димитров, С. Константинов, И. Дойчинова</i> , Инхибитори на ацетилхолинестеразата, избрани чрез докинг-базиран скрининг – доказване на концепцията	48
<i>Я. Л. Лазарова, Т. М. Додевска</i> , Модифицирани с родий въглеродни електроди: приложение за електрохимична детекция на водороден пероксид	54
<i>Н. Курчева, Т. Дудев</i> , Механизъм на терапевтично действие на абиогенните йони Li^+ и Ga^{3+} : изводи от теоретични изследвания	62
<i>Ц. Станимирова, З. Делчева, Н. Петрова</i> , Нова фаза, получена при взаимни трансформации на цинкови хидрокси-соли.....	72
<i>В. Дюлгерев, Хр. Сбиркова-Димитрова, Л. Цветанова, Р. Русев, Б. Шивачев</i> , Нов полиморф на Бизакодил	78
<i>Р. Русев, Л. Цветанова, Б. Шивачев, К. Косев, Р. Николова</i> , Уреати и хидрати на магнезиев хлорид, нитрат и тетрафлуороборат	89
<i>Г. Киров, Н. Петрова, Ц. Станимирова</i> , Само-замразително сушене със зеолити	96
<i>Р. Илиева, Е. Дюлгерова, О. Петров, М. Тарасов, А. Гусийска, Р. Василева</i> , Получаване на хидрохилапатит/хиалуранов биомиметичен нанохибриден материал за реконструкция на костни дефекти с критичен размер	105
<i>Р. В. Зайдел, С. Й. Зарева</i> , Кристални структури на L-левциниев хидрогенскварат монохидрат и DL-левциниев хидрогенскварат	113
<i>Л. Т. Димова, И. Пироева, С. Атанасова-Владимирова, Р. Русев, Б. Л. Шивачев</i> , Структурни особености на природен хабазит, модифициран чрез $ZnCl_2$ и $NiCl_2$	122
<i>С. Й. Зарева, Г. Г. Генчева</i> , Кристална структура и спектрални характеристики на 3-метилпиридазиниев хидрогенскварат	129
<i>С. Ангелова, В. Николова, Т. Дудев</i> , Изследване с теория на функционала на плътността на свързването на двувалентни метални йони с лактоза	134
<i>К. Л. Костов, Е. Белами, Б. Алонсо, Ц. Минева</i> , Химически състояния на повърхностите на целулоза, хитин и хитозан, изследвани чрез теорията на функционала на плътността и фотоелектронна спектроскопия с висока разделителна способност.....	146
<i>С. С. Стоянов, Е. А. Велчева, Б. А. Стамболийска</i> , ИЧ спектрални и структурни промени, причинени от превръщането на салофен в анион и дианион.....	155
<i>М. Тодорова, Р. Бакалска</i> , Синтез и вибрационни спектроскопски характеристики на серия йонни мероцианинови багрила.....	164
<i>Т. Р. Станкова, Г. Т. Делчева, К. И. Стефанова, А. И. Манева, С. В. Владева, Г. А. Цветкова</i> , 3-нитротирозин като серумен биомаркер за „нитроокислителен стрес“ и инсулинова резистентност при неусложнен метаболитен синдром.....	171

<i>Н. Данчова, Д. Паскалев, С. Гуцов, Аерогелове – нови материали с перспективни приложения</i>	177
<i>М. И. Къндинска, А. А. Василев, В. С. Видева, С. Е. Ангелова, Нов мономерен трикатионен монометинцианинов аналог на Тиазол оранж (ТО): синтез, фотофизични и двДНК-свързващи свойства</i>	184
<i>В. Мантарева, М. Алиосман, М. Дурмуш, И. Ангелов, Аминокиселинни заместители на фталоцианинови комплекси: обзор на синтетичните схеми и спектралните свойства с принос към фотодинамичните приложения</i>	192
<i>Я. Илиева, З. Коканова-Недялкова, П. Недялков, Г. Момеков, In silico оценка на ADME профилите и на лекарственото подобие на серия от цитотоксични полипренилирани ацилфлороглуциноли, изолирани от <i>Hypericum annulatus</i> Morris subsp. <i>annulatum</i></i>	199
<i>С. С. Димова, К. Л. Захариева, Ф. С. Ублеков, Хр. П. Пенчев, Представяне на метатезни реакции, използвайки различни наноразмерни феритен тип катализатори</i>	207
<i>Р. Николова, Сл. Мънков, Н. Петрова, Р. Титоренкова, Флуорввелит от долината на река Петрошница – Република Македония</i>	214
<i>М. Станева, И. Радев, Ф. Ублеков, Д. Будурова, В. Синигерски, Х. Пенчев, Протон-проводящи мембрани, съдържащи омрежена поливинилсулфонова киселина, използвани като полимерелектролитни мембрани за горивни клетки</i>	221
<i>К. Л. Захариева, К. И. Миленова, С. С. Димова, С. В. Василев, И. Д. Стамболова, В. Н. Блъсков, Влияние на условията за синтез върху фотокаталитичната способност на NiMnO₃/Mn₂O₃, NiMn₂O₄/NiMnO₃/Mn₂O₃ и Ni₆MnO₈/NiMnO₃/Mn₂O₃ за разграждането на малахитово зелено багрило под УВ-светлина</i>	227
<i>Д. Чешмеджиева, Н. Тошев, М. Герова, О. Петров, Т. Дудев, Сяра и селен съдържащи производни на субероил анилид хидроксамова киселина (SANA) като потенциални HDAC инхибитори: DFT изследване на тавтомерията и металния им афинитет/селективност</i>	236
<i>Е. Чернева, Р. Буюклиев, Н. Бурджиев, Р. Михайлова, А. Бакалова, Комплекси на Pd (II) и Pd (IV) с нов хидантоинов лиганд: синтез, охарактеризиране, теоретични и фармакологични изследвания</i>	242
<i>Х. Канети, С. М. Бакалова, И. П. Ангелов, Виждания за фотофизиката на изомери на 2-(2'-хидроксифенил)-хиназолин-4-он въз основа на моделиране с ТФП (DFT) в основно S₀ и възбудено S₁ състояние</i>	250
<i>Ж. В. Георгиева, А. Г. Угринов, Р. П. Николова, Б. Л. Шивачев, С. Й. Зарева, С. Г. Върбанов, Т. Д. Тошева, Г. Г. Генчева, Координация на бис((диметилфосфинил)метил)амин към мед(II). Получаване и кристална структура на моноядрен октаедричен комплекс на мед(II)</i>	259
<i>Ст. Котов, Х. Майер-Фиге, С. Зарева, 4-Метилхинолиниев водороденкварат: кристална структура и спектрална оценка</i>	269
<i>М. П. Тарасов, Е. Д. Тарасова, Структурна и химична еволюция на минерални форми на волфрама в окислителната зона на находище Грънчарица (Западни Родопи, България)</i>	280
<i>ИНСТРУКЦИЯ ЗА АВТОРИТЕ</i>	281