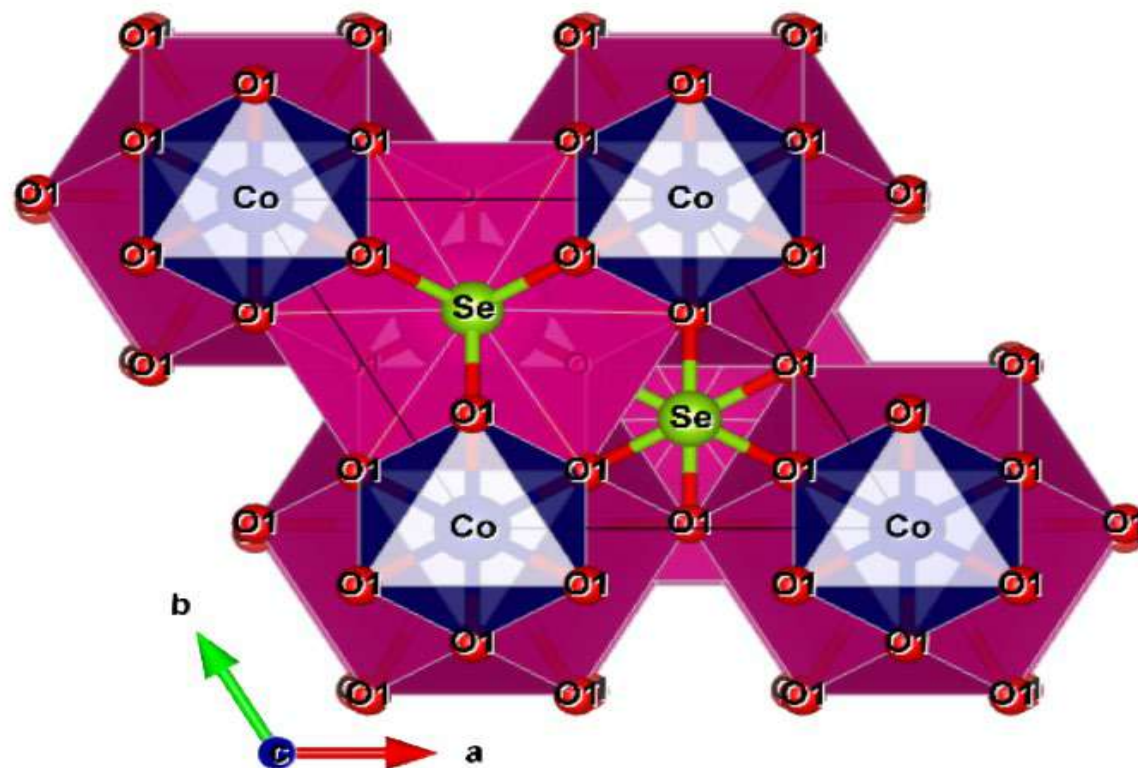


УНИВЕРСИТЕТ „ПРОФ. Д-Р АСЕН ЗЛАТАРОВ“ – БУРГАС
НИХ – 500/2024

ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ И ТЕОРЕТИЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ НА СЕЛЕНСЪДЪРЖАЩИ СЪЕДИНЕНИЯ

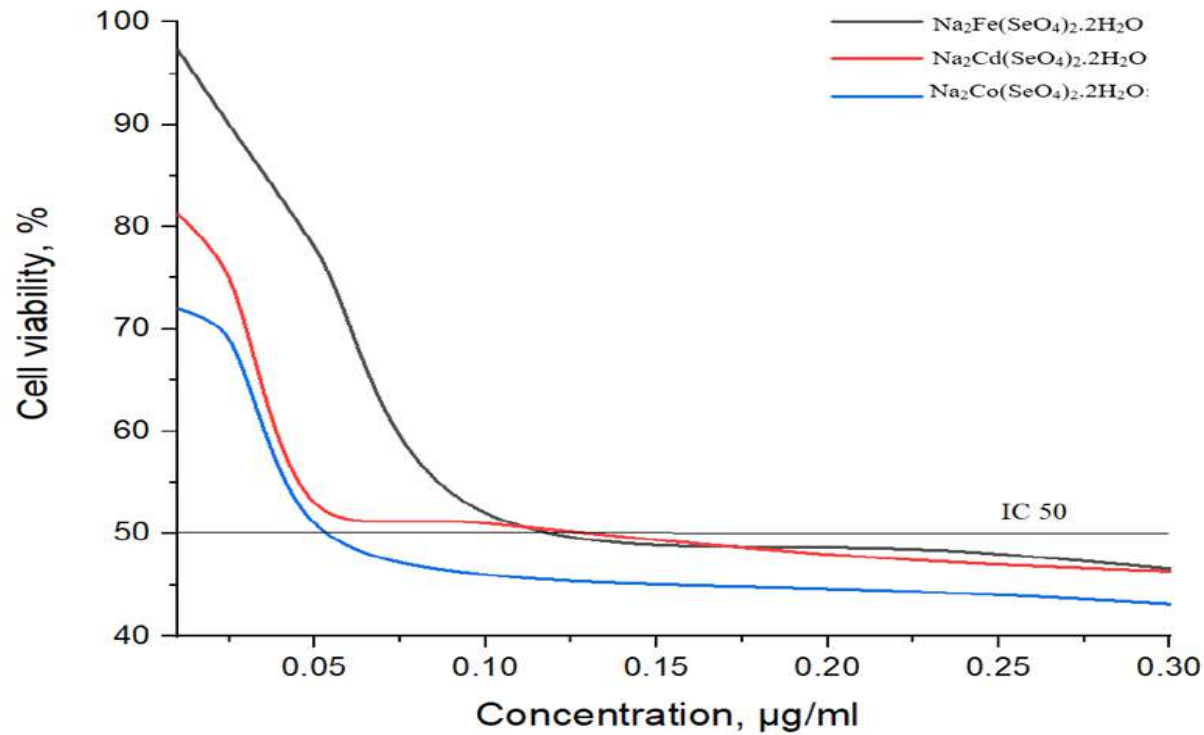


РАБОТЕН КОЛЕКТИВ

- **Гл. ас. д-р Денчо Иванов Михов**, кат. “Химия”, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров” – (ръководител на проекта)
- **Проф. д-р Румяна Златинова Янкова**, кат. “Химия, биохимия, биология и микробиология”, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”
- **Доц. д-р Веляна Георгиева Георгиева**, кат. “Химия”, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”
- **Кремена Тодорова Тодорова**, докторант, кат. “Химия”, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”
- **Цветелина Христова Йотова**, докторант, кат. „Химия“, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”
- **Виктория Христова Янева** - студент II курс, Фак. № ЕООС1170, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”
- **Кристиян Върбанов** - студент III курс, фак. МЕД296, БДУ “Проф. д-р Асен Златаров”

ЦЕЛ НА ИЗСЛЕДВАНЕТО

Синтезиране и изследване на селенсъдържащи съединения. Доказване на техния състав и строеж чрез теоретични и експериментални подходи. Изследване на електронните им свойства и тяхната реактивоспособност. Предлагане на област на приложение на новополучените селенсъдържащи съединения.



ЗАДАЧИ

- Синтезиране на селенсъдържащи съединения.
- Охарактеризиране на съединенията чрез рентгеноструктурен, термогравиметричен анализ и инфрачервена спектроскопия.
- Изчисляване на молекулната и електронна структура на получените съединения с помощта на квантовохимични методи.
- Изследване на реактивоспособността на съединенията.
- Изследване на различни области на приложение на съединенията

ПОСТИГНАТИ НАУЧНИ РЕЗУЛТАТИ

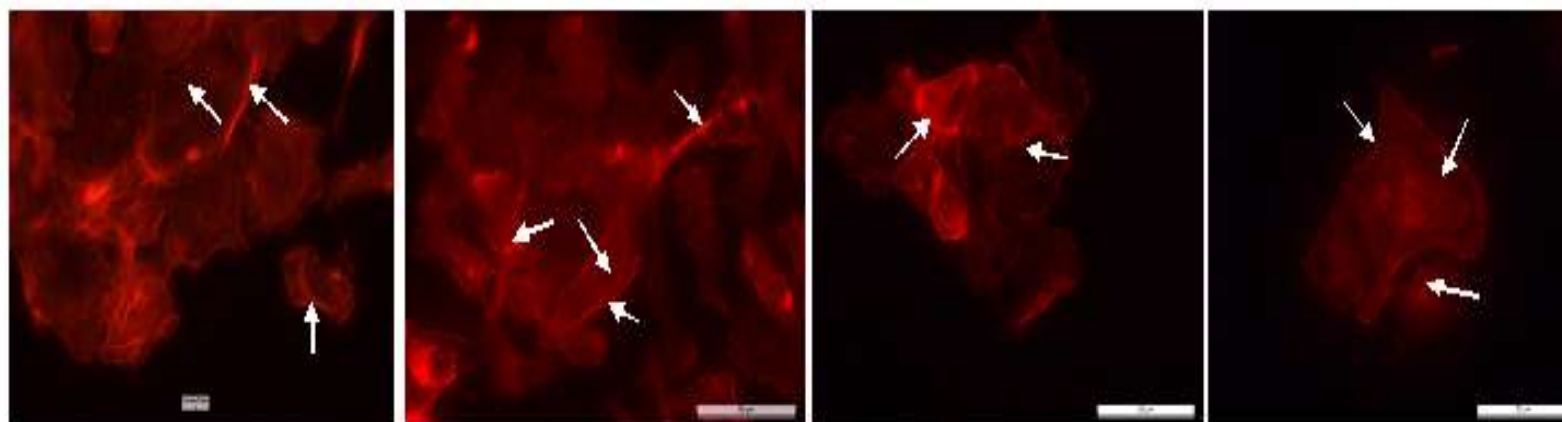
В съответствие с утвърдената план-програма за втората година на проекта в периода април 2025 г. – ноември 2025 г., се решиха следните задачи:

- Изследвана е електронната структура и химичната реактивоспособност на новосинтезираното съединение $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$ с помощта на Теорията на функционала на плътността (DFT/B3LYP) с базисен набор 6-311++G(2d,2p). Изчислени са нелинейните оптични свойства на съединението, Приложена е теорията на Бейдър „Атоми в молекулите“, за да се определят вътрешномолекулните взаимодействия. Използвана е повърхността на Хиршфелд, за да се анализират междумолекулните взаимодействия. Чрез анализа на намалена електронна плътност (RDG) са изследвани нековалентните взаимодействия
- Синтезирани са следните съединения: KHSeO_4 , $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{SeO}_4$, $\text{K}_2[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SeO}_4)_2$ и $\text{Na}[\text{Fe}_3(\text{OH})_6(\text{SeO}_4)_2]$. Структурата на съединенията е определена чрез рентгеноструктурен анализ.

- Новосинтезираните двойни селенати са изследвани чрез IR и UV-vis спектроскопия.
- Проведен е термичен анализ - DTA-TG-DTG. Образците са изследвани с апарат за симултантен термичен анализ SetSys Evolution 2400 (SETARAM, France) при следните условия: температура на нагряване 25-900°C, времетраене – 1.5 часа, поток от аргон, скорост на нагряване 10°C/мин и тегло на пробата между 5-10 мг в стабилизирани циркониеви тигли.
- Температурните зависимости на моларните топлинни капацитети на $\text{MeCo}(\text{SeO}_4)_2$ (Me = Na, K, Rb, Cs) са определени. Чрез статистическа обработка на получените стойности са изчислени параметрите в уравненията, описващи тези зависимости, като е използван методът на най-малките квадрати. Тези уравнения и стандартните моларни ентропии са използвани за определяне на термодинамичните функции $\Delta_0^T S_m^o$, $\Delta_T^T H_m^o$, и $\Phi_m^o + \Delta_0^T H_m^o / T$
- за $T = 298.15 \text{ K}$.

СПИСЪК НА НАУЧНИ ПУБЛИКАЦИИ В НАУЧНИ СПИСАНИЯ, ПРЕДОСТАВЕНИ В СВЕТОВНИ ВТОРИЧНИ ЛИТЕРАТУРНИ ИЗТОЧНИЦИ:

- 1. Mihov D., Yankova R., Yotova T., Yaneva V., Varbanov K. Molar heat capacities of alkali–cobalt double selenates. Annu. Univ. Prof. Dr. Assen Zlatarov, Burgas LIV (1) (2025).



control

$\text{Na}_2\text{Cd}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
0.01 µg/ml

$\text{Na}_2\text{Cd}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
0.1 µg/ml

$\text{Na}_2\text{Cd}(\text{SeO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
1 µg/ml

СПИСЪК НА НАУЧНИ ПУБЛИКАЦИИ В ИЗДАНИЯ С ИМПАКТ ФАКТОР (WEB OF SCIENCE) И ИМПАКТ РАНГ (SCOPUS):

1. Yotova T., Avramov M., Yankova R. Structural characterization of hydrothermally grown $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$: A crystallographic and Hirshfeld surface study. *Oxid. Commun.*, 48 (2025) 1015–1028.
2. Yotova, T.H., Yankova, R.Z. Theoretical Insights into the Structure, Bonding, and Nonlinear Optical Properties of $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$: A DFT and QTAIM Study, *Russ. J. Inorg. Chem.*, 70 (2025) 1326–1336.
3. Yankova R., Yotova T., Avramov M. DFT investigation of electronic structure, reactivity, and molecular interactions in a selenate–selenite system. *Russ. J. Gen. Chem.* 95 (2025) 1543–1553.
4. Yankova R., Yotova T., Avramov M., Benkova D., Dimov D., Kostadinova A., Markov P. A new selenium nanomaterial: structural insights, nonlinear optical properties (DFT study), and biological potential. *J. Mol. Model.* 31 (2025) 160.

МЕРКИ ЗА ОСИГУРЯВАНЕ НА ПУБЛИЧНОСТ НА РЕЗУЛТАТИТЕ

1. Участие във Втора научна сесия за студенти, докторанти и млади научни работници „Медицински науки“, 25 април 2025 г., Бургас, Цветелина Йотова, Денчо Михов, Наноструктуриран селен: Оптични характеристики и биологичен потенциал.
2. Участие в Научна сесия за студенти, докторанти и млади научни работници „Природни и технически науки“, 25 април 2025 г., Бургас, Виктория Янева, Денчо Михов, Термодинамично охарактеризиране на двойни соли на селенати.
3. Участие в XXXV Международна online научна конференция, 05-06 юни 2025 год., Стара Загора, Tsvetelina Yotova, Rumyana Yankova, Structural and spectroscopic study of rubidium cobalt selenite: crystallography and analysis of intermolecular interactions.
4. International Conference "Science-Industry-Society Nexus for Sustainable Regions" (SISNEXUS 2025), which will take place from June 12 to 14, 2025, in Burgas, Bulgaria, Tsvetelina Yotova, Rumyana Yankova, Theoretical Characterization and NLO Potential of $\text{Rb}_2\text{Co}(\text{SeO}_3)_2$: Insights from DFT and QTAIM Analyses.
5. Защитена дипломна работа на тема: „Реактивоспособност и биологична активност на селенсъдържащи наноструктури“ от Искра Христова Султонова, Ф № МХ76, с научен ръководител проф. Румяна Янкова и консултант Цветелина Йотова.

АКТУАЛНОСТТА НА ПОЛУЧЕНИТЕ РЕЗУЛТАТИ Е ОТРАЗЕНА В ЦИТАТИТЕ, КОИТО СА ПОЛУЧЕНИ ОТ ПУБЛИКАЦИИТЕ ОЩЕ В ГОДИНАТА НА ТЯХНОТО ИЗДАВАНЕ, А ИМЕННО:

Yankova, R.; Yotova, T.S.; Avramov, M. DFT Investigation of Electronic Structure, Reactivity, and Molecular Interactions in a Selenate–Selenite System. *Russ. J. Gen. Chem.* 95, 1543–1553, (2025).

1. Gargouri A., Jamoussi B. Molecular-level insights into meta-phenylenediamine and sulfonated zinc phthalocyanine interactions for enhanced polyamide membranes: a DFT and TD-DFT study. *Polymers* 17 (15) (2025) 2019. <https://doi.org/10.3390/polym17152019>

Yankova, R., Yotova, T., Avramov, M., Benkova, D., Dimov, D., Kostadinova, A., Markov, P., A new selenium nanomaterial: structural insights, nonlinear optical properties (DFT study), and biological potential. *J Mol Model* 31, 160 (2025).

2. Hussain F., Hussain R., Irshad Z., Hussain M., Khan M.U., Yaqoob J., Ayub K., Adnan M. Modulation of third-order nonlinear optical response in copper-induced gold nanoclusters. *J. Phys. Chem. A* (2025). <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c04139>.

3. Khalid M., Iqbal M.A., Ali S., Shahid M. Bioactivity enhancement by amide functionalization in NHC-derived organoselenium compounds: synthesis, characterization, DFT study, ADMET prediction, molecular docking and antimicrobial evaluation. *Inorg. Chem. Commun.* (2025) 115706. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2025.115706>.

ФИНАНСОВ ОТЧЕТ ЗА РАБОТНИЯ ПЕРИОД НА ПРОЕКТА

- Канцеларски материали – 235.00 лв.
- Анализи – 2400.00 лв.
- Рецензент – 65.00 лв.
- Административно/финансово-счетоводно обслужване – 10% от стойността на договора – 300.00 лв.

ОБЩО – 3000.00 лв.