

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. Cabrera, 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

<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

И. Б. Благоева, Ел. П. Игнатова-Аврамова, Ас. Х. Коеджиков, Ив. Г. Пожарлиев, Л. И. Проевска, В. Т. Рачина, Н. Г. Василев, Линейни зависимости на свободните енергии на гем-диметил ефекта (гем-диалкил ефекта)	396
М. Д. Маринова, Б. П. Чорбанов, Растенията от сем. <i>Brassicaceae</i> като източник на хранителни пептидази	400
С. Илиева, Я. Атанасов, Б. Гълъбов, Теоретично изследване на механизма на аминоклизата на фенилацетат	408
Св. Симеонов, В. Б. Куртева, Р. П. Бончев, Едностадийн синтез на симетрични азини под действие на микровълни в отсъствие на разтворители	417
Й. Димитрова, 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
Л. Ив. Даскалова, Й. Димитрова, Теоретично изследване на структури и стабилност на водородно-свързани системи между пиридин-3-карбоксамид (никотинамид) и ДМСО	432
Ев. А. Велчева, П. Ж. Василева-Бояджиева, Ив. Г. Бинев, Експериментално и ТФП изследване на ИЧ спектрални и структурни промени произтичащи от превръщането на 1Н-индол-2,3-дион (изатин) в азанион	439
Д. И. Иванова, Ил. И. Тимчева, Б. А. Стамболийска, Д. И. Бътовска, Абсорбционни и флуоресцентни характеристики в УВ-видимата област на някои заместени в стирилния фрагмент синтетични халкони	444
Б. А. Стамболийска, А. Д. Попова, Е. А. Велчева, Теоретично изследване на конформационните предпочитания на N-[(4-аминофенил)сулфонил]ацетамид (сулфацетамид) и неговия азанион	449
Сн. М. Бакалова, Х. Ян. Канети, Об. Д. Кастаньо, Изчислително моделиране на електронните спектри на някои багрила, съдържащи връзката В-N	455
Б. Б. Колева, 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
Г. Ив. Иванова, Еур. Ж. Кабрита, Р. О'Конор, Ал. Дж. Юстасе, Д. Ф. Броухам, Приложение на дифузионно подредена спектроскопия за анализ на ракови биологични проби	468
М. Г. Спасова, Д. П. Панева, Н. Ем. Манолова, Ил. Б. Рашков, Получаване на нови хитозан-съдържащи микро- и нановлакнести материали чрез електроовлажняване	476
Е. Д. Чернева, Ц. М. Колев, Поларизационно ИЧ-спектрално изследване на високотемпературната "червена" фаза на 5-амино-2-метоксипиридин естер amid на етиловия естер на квадратната киселина	482
Ц. Цанев, Ц. М. Колев, Спектрално охарактеризиране на хидрогенскварат и естер amid на квадратната киселина с 2-хлор-3-аминопиридин	490
О. Стоилова, Хр. Пенчев, Т. Русков, Ив. Спиров, Н. Манолова, Ил. Рашков, Едноетапно получаване на магнитни хитозанови сфери	497
Б. А. Стамболийска, Д. Я. Янчева, Ц. М. Колев, Теоретично изследване на структурата, електронните спектри и нелинейните оптични свойства на пиридин-бетаините на квадратната киселина	504
М. И. Котев, П. М. Иванов, Молекулно-механичен (ММ3(π)) конформационен анализ на молекули съдържащи спрегнати π-електронни фрагменти: молекулна пинсета	511
Ан. Д. Попова, Юр. Ив. Бинев, П. Ж. Василева-Бояджиева, Ив. Г. Бинев, 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
Й. Ан. Ценов, С. С. Стоянов, Ив. Г. Бинев, ИЧ-спектрални и структурни промени, породени от превръщането на 4-цианобензамид в азанион. Комбиниран експериментално-теоретичен подход	525
Н. Г. Василев, <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-β</i> -амино-нитрили. Удобна синтеза на <i>транс</i> -азетидин-2-имини	571
Авторен указател	583
Предметен указател	587