

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. Sohou, 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. Проєвска, 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 |