

## Информация за финансиран на проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2021 г.
<b>Основна научна област:</b>
Химически науки
<b>№ на договор:</b>
КП-06 Н59/7
<b>Начална дата на проекта и срок на договора:</b>
36 месеца
<b>Заглавие на проекта:</b>
Фотохимия на (изо)гуанин-(изо)цитозин базовите двойки
<b>Базова организация:</b>
ПУ „Паисий Хилендарски”
<b>Партньорски организации:</b>
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
проф. дхн Васил Борисов Делчев
<b>Общ размер на договореното финансиране:</b>
166 914 лв

**Резюме на проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):**

Целта на проекта е да изследва сравнително фотостабилността на Уотсън – Крик базовите двойки гуанин-цитозин (G-C) и нейния аналог изогуанин-изоцитозин (iG-iC), с помощта на теоретични (DFT и coupled-cluster) и експериментални методи. Това изследване би могло да даде частичен отговор на фундаменталния въпрос, защо природата „е избрала“ базовата двойка G-C вместо iG-iC за включване в макромолекулата на ДНК. Частичен отговор на този въпрос може да се търси във фотохимията на двете базови двойки. Възнамеряваме да проведем експериментално УВ облъчване на водни разтвори от еквимоларни количества G-C и iG-iC и да проследим евентуални промени, които биха се наблюдавали (кинетика) чрез измерване на УВ спектрите. Прахов рентгенов дифракционен и вибрационен анализ на твърди образци от облъчени и необлъчени проби G-C и iG-iC са включени също в експеримента. Теоретичното изследване включва изучаване на реакционните пътища на реакции, свързващи минимума и конични сечения  $S_0/S_1$ , последните свързани с деформации на ароматните пръстени и H-преноси. Най-предизвикателната част е тази за намиране и оптимизация на конични сечения  $S_0/S_1$  на процесите, което е свързано с продължителни във времето изчисления на CASSCF теоретично ниво и различно активно пространство. За намирането на реакционни пътища на възбудените състояния ще се използват предимно два подхода: линейна интерполация във вътрешни координати (LIIC) и IRC изчисления. Част от пресмятанята ще бъдат проведени в ТУ на Виена с използване на Виенския научен клъстер (VSC). Най-голямата част от бюджета на проекта е предвидена за експериментално оборудване на фотохимичната лаборатория (УВ спектрофотометър), а също и за софтуер (GAUSSIAN, TURBOMOLE, MOLPRO) и хардуер (дисков масив, HDDs и др.) за съществуващия в Химическия факултет на Пловдивския университет линукс-клъстер.

## Членове на научния колектив

<b>Организации/участници<sup>1</sup></b>	<b>Бележка<sup>2</sup></b>
<b>Базова организация:</b>	
ПУ „Паисий Хилендарски“	
<b>Ръководител на научния колектив</b>	
проф. дхн Васил Борисов Делчев	учен
<b>Участници:</b>	
1. доц. д-р Румяна Иванова Бакалска (ПУ) 2. ст. изследовател д-р Ернст Хоркел (ТУ – Виена) 3. доц. д-р Иван Георгиев Щерев (УХТ) 4. гл. ас. д-р Атанас Танов Терзийски (ПУ) 5. гл. ас. д-р Мина Михайлова Тодорова (УХТ) 6. Цветина Димитрова Чернева (ПУ) 7. Стоян Иванов Тенев (ПУ)	учен УЧ учен учен учен СТ техник
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	

1 Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

2 Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), или учен от чужбина (УЧ).