

## РЕЗИЮМЕТА

на английски и на български език на статиите на ас. София Славова, представени за придобиване на образователна и научна степен „доктор” по професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност “Теоретична химия” (шифър 01.05.01) към лаборатория “Теоретична и изчислителна химия” при ИОНХ-БАН. Тема на дисертационен труд “Механизми на пребиотични реакции на основата на формамид – *ab initio* моделиране“. (Научен ръководител: проф. дн Венелин Енчев).

- (1) Slavova, S.; Enchev, V. **Self-catalytic Mechanism of Prebiotic Reactions: From Formamide to Purine Bases.** *Int. J. Quantum Chem.* 120 (19), 2020, e26362. <https://doi.org/10.1002/qua.26362>.

**IF=2.26, Q2**

**Abstract:** Complete reaction pathway of prebiotic reactions for formation of the purine nucleobases adenine, hypoxanthine, guanine, isoguanine, 2,6-diaminopurine, and xanthine from pure formamide are presented. All reactants (hydrogen cyanide, ammonia, water, formic acid, urea) and catalysts (formamide and formimidic acid) needed in the self-catalyzed reactions are available from a starting compound, formamide. The required raw materials are obtained by partial decomposition of formamide.

**Автокаталитични механизми на пребиотичните реакции: от формамид до пуринови нуклеобазы**

**Резюме:** Представен е пълен реакционен път на пребиотични реакции за образуване на пуриновите нуклеобазы аденин, хипоксантин, гуанин, изогуанин, 2,6-диаминопурин и ксантин от чист формамид. Всички реагенти (циановодород, амоняк, вода, мравчена киселина, карбамид) и катализатори (формамид и формимидинова киселина), необходими за автокатализираните реакции, са получени от изходно съединение, формамид. Необходимите изходни съединения се получават чрез частично разлагане на формамид.

- (2) Enchev, V.; Angelov, I.; Dincheva, I.; Stoyanova, N.; Slavova, S.; Rangelov, M.; Markova, N. **Chemical Evolution: From Formamide to Nucleobases and Amino Acids without the Presence of Catalyst.** *J. Biomol. Struct. Dyn.* 39, 2021, 1–16. <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1792986>.

**IF = 3.31, Q2**

**Abstract:** Abiotic synthesis of nucleobases and amino acids is of critical importance as it sheds light on potential prebiotic chemical reactions. During thermal decomposition of formamide in vacuum conditions, purine, cytosine, adenine, hypoxanthine, uracil, pterin, urea, urocanic acid, glycine, alanine and norvaline were detected. The compounds were obtained without catalyst by heating at 100–180 °C or microwave heating of formamide. Reaction network of self-catalyzed chemical reactions is suggested, showing how from only one parent molecule, nucleobases, urea

and the amino acid glycine can be produced. The reaction pathways are theoretically determined using SCS-MP2 calculations.

### **Химична еволюция: от формамид до нуклеобазы и аминокиселини без катализатор**

**Резюме:** Абиотичният синтез на нуклеобазы и аминокиселини е от решаващо значение, тъй като хвърля светлина върху потенциалните пребиотични химични реакции. По време на термично разлагане на формамид под вакуум бяха открити пуриин, цитозин, аденин, хипоксантин, урацил, птерин, карбамид, уроканова киселина, глицин, аланин и норвалин. Съединенията са получени без катализатор чрез нагриване при 100-180<sup>0</sup>С или микровълново нагриване на формамид. Предложена е реакционна мрежа от автокаталитични химични реакции, показваща как само от една родителска молекула, може да се получат различни нуклеобазы, карбамид и аминокиселината глицин. Реакционните пътища са определени теоретично с помощта на квантово-химични изчисления на ниво SCS-MP2.

- (3) Enchev, V.; Slavova, S. **Self-catalytic Mechanism of Prebiotic Reactions: II. From Urea and Glycinamide to Hypoxanthine.** *Int. J. Quantum Chem.* 121, 2021, e26508

<https://doi.org/10.1002/qua.26508>.

**IF = 2.26, Q2**

**Abstract:** Mechanisms of reactions for formylation of urea, leading to N,N'-diformylurea, and for the dehydration of glycinamide and N,N'-diformylurea, yielding hypoxanthine, are suggested. It is shown that these reactions are self-catalyzed. The first is catalyzed by formic acid, while the second is catalyzed by N,N'-diformylurea. The suggested reaction mechanism shows that the N3 and N9 atoms of hypoxanthine originate from urea in agreement with available <sup>1</sup>H NMR experimental data by Lagoja and Herdewijn (Lagoja & Herdewijn, *Chem. Biodiv.* **2004**, 1, 106). A complete reaction pathway of prebiotic reactions for formation of the hypoxanthine from urea, formic acid, and glycinamide in formamide, where formamide/formimidic acid plays the role of a proton-carrying catalyst, is also suggested.

### **Автокаталитични механизми на пребиотичните реакции: II. От карбамид и глицинамид до хипоксантин**

**Резюме:** Предложени са механизми на реакции на формилиране на карбамид, водещи до N,N'-диформилкарбамид и на дехидратация на глицинамид и N,N'-диформилкарбамид, при което се получава хипоксантин. Показано е, че тези реакции се автокаталитични. Първата се катализира от мравчена киселина, докато втората се катализира от N,N'-диформилкарбамид. Предложеният реакционен механизъм показва, че атомите N3 и N9 на хипоксантин произхождат от карбамид в съгласие с наличните <sup>1</sup>H ЯМР експериментални данни от Lagoja и Herdewijn (Lagoja & Herdewijn, *Chem. Biodiv.* **2004**, 1, 106). Предложен е и пълен реакционен път на пребиотични реакции за образуване на хипоксантин от карбамид, мравчена киселина и глицинамид във формамид, където формаида или формимидиновата киселина играят ролята на катализатор, пренасящ протон.