

РЕЗЮМЕТА НА ОСНОВНИТЕ РЕЗУЛТАТИ И НАУЧНИ ПРИНОСИ

на гл.ас. д-р инж. Андриана Риск Сурлева,
представени за участие в конкурс за доцент по
4.2 Химически науки (Аналитична химия)
към ХТМУ, 2014г.

ТЕМА 1: РАЗРАБОТВАНЕ НА АНАЛИТИЧНИ МЕТОДИ И ХИМИЧНИ СЕНЗОРИ

1а. **A. Surleva, G. Drochioiu, *A modified ninhydrin micro-assay for determination of total cyanogens in plants*, Food Chemistry 141 (2013) 2788–2794; IF 4.268**

Представен е модифициран спектрофотометричен микрометод за определяне на цианогени в растения с нинхидрин като фотометричен реактив. Законът на Беер е валиден в концентрационния интервал от 20 до 800 $\mu\text{g/L}$ CN^- с моларна абсорбируемост $\varepsilon=1,4 \cdot 10^5 \text{ L/mol.cm}$. Аналитичният добив при концентрация на CN^- 100 $\mu\text{g/L}$ е $100,5 \pm 0,1 \%$, границата на детекция е 8 $\mu\text{g/L}$, а границата на количествено определяне е 22 $\mu\text{g/L}$. Дискутирани са условията за приготвяне и съхранение на нинхидриновия реактив. Оптимизирани са условията на ензимна хидролиза на растителните цианогени, на екстракция и разделяне на образувания HCN : вид и обем разтворителите, реакционно време. Като екстрахиращ разтворител за HCN , получен при ензимна хидролиза на растителни цианогени, е използван 0,1 % разтвор на NaHCO_3 . Предложената процедура е подходяща за проби, съдържащи повече от 90 mg CN на 100 g проба. За проби с по-ниско съдържание на цианогени, за разделяне на получения след ензимна хидролиза HCN , е предложено микродифузионно разделяне в клетка на Conway, в която донорен разтворител и среда за хидролиза е дест. вода, а акцепторния разтвор е 2% NaCO_3 . Представени са резултатите от изследване на селективността на реактива към цианидни йони в присъствие на компоненти, типични за изучените растителни матрици. Определено е общото съдържание на цианогени в костилки от сини сливи, бадеми, ленено семе и семена от ябълки.

1б. **A. Surleva, M. Zaharia, L. Ion, R. Gradinaru, G. Drochioiu, I. Mangalagiu, *Ninhydrin-based spectrophotometric assays of trace cyanide*, Acta Chemica Iasi 21(2013) 57-70**

1в. **A. Surleva, G. Drochioiu, *Fast and Highly Sensitive Determination of Total Cyanogens with Ninhydrin*, In: J. S. Amaral, I. Mafra, L. Barros, J. Barreira, I. C.F.R. Ferreira, M. B. Oliveira (Eds) 11th Meeting of Food Chemistry. Quality of food: new challenges. Instituto Politécnico de Bragança (2012) p. 138.**

2. **A. Surleva, R. Gradinaru, G. Drochioiu, *Cyanide poisoning: from physiology to forensic analytical chemistry*, International Journal of Criminal Investigation 2(2) (2012) 79-101**

Токсичността на цианидните съединения, тяхната широка индустриална употреба, както и продължаващото нелегално използване провокира интереса на изследователи от различни научни области, което налага и мултидисциплинарен

подход при изучаване на цианидните отравяния. В настоящия обзор са обобщени публикуваните данни относно токсикологията на цианидните отравяния, съвременните постижения в методите за детоксикация, както и източниците на цианидни замърсители. С оглед на факта, че постиженията на изследователите от областите: екология, медицина, криминалистика, са тясно свързани с методите за анализ, основната част на обзора е посветена на развитието на аналитичните методи за определяне на цианиди. Аналитичните методи са разделени в три групи според вида на пробите, в които се определят цианиди: (а) анализ на биологични обекти; (б) анализ на проби от околната среда; (в) анализ на храни и напитки. Представени са работните области, основните аналитични характеристики, експерименталните условия и някои особености. Представени са само методи, приложени към реални проби. Подробно са дискутирани най-перспективните разработки от всяка група. Обобщени са 118 литературни източника. Дискутираният период е различен за всяка група методи и зависи от последния публикуван обзор.

3. A. Surleva, G. Drochioiu, Visualizing Smoking Hazard: A Simple spectrophotometric determination of hydrogen cyanide in cigarette smoke and filter, Journal of Chemical Education 90 (2013) 1654–1657; IF 0.817

Разработен е метод за определяне на циановодород в цигарен дим и цигарен филтър. Методът е основан на абсорбция на HCN в 2% разтвор на натриев карбонат, последваща цветна реакция с нинхидрин и измерване на абсорбцията при 485 nm. На тази основа е разработено лабораторно упражнение, в което може да се използва предварително определена моларна абсорбируемост за количествено определяне или (в зависимост от нивото на обучаемите) да се приложи визуална индикация за качествено определяне на HCN и демонстрация на токсичността на цигарения дим. „За генериране на цигарен дим“ е предложена достъпна установка, основана на ефекта на „водната помпа“. Методиката е лесна за изпълнение, използва нетоксични и евтини реактиви, може да се използва като практическо или демонстрационно упражнение. Предложени са разработени учебни материали: инструкции за студенти, инструкции за преподавателя, примерни въпроси за дискусия.

4. A. Surleva, S. Bancila, E. Todorova, A study on ninhydrin reaction with weak acid dissociable cyanide and its application for toxic cyanide determination, Science Journal of Analytical Chemistry 2 (2014) 1-6

Международните екологични агенции разделят цианидните замърсители на три групи според токсичността им: свободен цианид, леснодисоциируем цианид и общ цианид. Замърсителите от първите две групи се смятат за особено токсични и пределно допустимите концентрации са значително по-ниски. ПДК за леснодисоциируеми цианиди в питейни води е 50 µg CN/L и екологичният контрол изисква чувствителни методи за определяне на метал-цианидни комплекси от групата на лесно дисоциируеми цианиди. Както е описано в публикация 1, реакцията между нинхидрин и свободен цианид е чувствителна, бърза (15 мин), селективна, включва слабо токсични реактиви. В този доклад изследванията са разширени върху взаимодействието на

нинхидрин и комплексно свързан цианид. Представени са и резултатите от сравнително изследване на двата известни в литературата методи за спектрофотометрично определяне на цианид с нинхидрин: Метод на Drochioiu, който включва образуване на червенооцветен продукт в карбонатна среда при рН 10,8 и измерване на абсорбцията при 485 nm и метод на Nagaraja et al., който включва реакция в карбонатна среда, алкализирание до рН 12 и измерване на абсорбцията при 580 nm. Резултатите показват, че метод (1) е с по-голяма чувствителност и дава по-надеждни резултати (едновалентният червенооцветен йон на хидриндата е по-стабилен). За разширяване на работния концентрационен обхват е приложена диференциална спектрометрия. Представени са и резултатите от директното определяне на цианид в присъствие на метал-цианидни комплекси: $\text{Hg}(\text{CN})_4^{2-}$; $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$; $\text{Cu}(\text{CN})_4^{3-}$; $\text{Ag}(\text{CN})_2^-$; $\text{Zn}(\text{CN})_4^{2-}$; $\text{Cd}(\text{CN})_4^{2-}$. Аналитичният добив е средно 100 % (определен по калибровъчна права построена със стандарти, съдържащи свободен цианид) с изключение на $\text{Cu}(\text{CN})_4^{3-}$. В този случай се препоръчва калибриране със стандарти, съдържащи мед-цианиден комплекс. За освобождаване на свързания цианид е приложен лиган-обменен подход. Изучени са следните лиганд обменни реактиви: цистин, цистеин, тиокарбамид, тетраетиленпентамин, както и техни комбинации. Резултатите показват, че фотометричният реактив е селективен в присъствие на лиган-обменните реактиви и е перспективен реактив за определяне на общия леснодисоциируем цианид без предварително разделяне.

5. N. Stoilova, A. Surleva, G. Stoev, *Simultaneous determination of nine quinolones in food by liquid chromatography with fluorescence detection*, Food Anal. Methods 6 (2012) 803-813; IF 1.973

Разработен е метод за едновременно определяне на девет контролирани хинолона (Council Regulation 2377/90/ECC) в шест матрици от животински произход. Подготовката на пробата включва два етапа: точно-течна екстракция с ацетонитрил и пречистване чрез твърдофазна екстракция върху Oasis HLB колона. Разработена е градиентна елуентна програма за хроматографско разделяне на хинолоните върху C18 Zorbax колона с мобилна фаза: мравчена киселина, метанол, ацетонитрил. Детекцията е флуоресцентна с програмирано изменение на дължините на вълните на възбуждащото лъчение и дължината на вълната на измерване на емисията, с цел осигуряване на по-висока чувствителност на определянето. Методът е валидиран съгласно Commission Decision 2002/657 EC. Долната граница на количествено определяне е от 7.5 to 100 $\mu\text{g}/\text{kg}$ и граница на детекция е от 3 до 50 $\mu\text{g}/\text{kg}$ за различните хинолони. Аналитичният добив при концентрация, отговаряща на максималната допустима концентрация (МДК), е между 77 и 120 % с RSD 30%. За хинолони, за които няма официално установена МДК, точността и прецизността на метода са оценени при концентрации, отговарящи на най-ниската концентрация от линейната част на калибровъчната графика. Определени са границата на откриване и линейния концентрационен работен обхват в яйца, мляко, риба, агнешки мускул, пилешки мускул и свински бъбреци.

6. N. Stoilova, A. Surleva, G. Stoev, *Determination of quinolones in food of animal origin by liquid chromatography coupled with fluorescence and mass spectrometric detection*, Acta Chromatographia (2014) 1-16; DOI: 10.1556/ACrom.26.2014.4.3; IF 0.485

Този доклад представя резултатите от изследване на възможностите на аналитичен метод основан на точна хроматография с флуоресцентна и мас спектрометрична детекция за едновременно определяне на девет официално контролирани хинолони в храни от животински произход, съгласно (Council Regulation 2377/90/ECC). Разработената методика за подготовка на пробата (подробно описана в публикация 5) е ефективна за изолиране на 9-те хинолона и не се наблюдават пречения и при мас-спектрометричната детекция. Сравнена е ефективността за разделяне на хинолони на четири нови хроматографски колони: Gemini C18 и Synergi Polar RP (от типа fully porous particles), Kinetex PFP и Poroshell 120 EC-C18 (от типа core-shell particles) и тяхното съчетание с електроспрей – тандем мас-спектрометрична детекция. Разработени са градиентни програми за ефективно разделяне на хинолоните при всяка от изследваните колони. Двата описани метода (HPLC с флуоресцентна и МАС спектрометрична детекция) имат долна граница на чувствителност под максимално допустимите концентрации в продукти от животински произход. Представени са резултатите от оценка на аналитичните характеристики при най-ниските концентрации на линеен сигнал. LC-MS/MS методът позволява определяне на 9 хинолона за по-малко от 5 мин. Двата метода имат граница на откриване под пределно допустимите концентрации за хинолони в храни.

7. L. Ilcheva, G. Kabaktschieva, P. Bozadjiev, A. Surleva, Zh. Denchev, *Analytical control of iodine content in the alcohol-free drink Maltina-Iod*, Bulgarian Chemistry and Industry, 71 (2000) 87-89

Разработен е директен метод за определяне на съдържанието на йодид в безалкохолна малцова напитка. Методът е основан на директна йон-селективна потенциометрия и се характеризира с добра точност и прецизност. Изследвана е възможността за прилагане на диференциална потенциометрия за намаляване на влиянието на дифузионния потенциал и подобряване на прецизността на измерванията в проби със сложен матричен състав, каквато е новоразработената напитка.

8. N. Georgiev, I. Yaneva, A. Surleva, A. Asiric, V. Bojinov, *Synthesis, sensor activity and logic behavior of a highly water-soluble naphthalimide derivative*, Sensors and Actuators B 184 (2013) 54– 63; IF 3.840

Този доклад представя дизайн, синтез и сензорна активност на нов водоразтворим флуорофор: 9,10-dihydro-7H-imidazo[1,2-b]benz[d,e]isoquinolin-7-one. Структурата на новосинтезираното съединение следва принципа „флуорофор-спайсер-рецептор“. Флуоресцентната активност на получения флуорофор се дължи на едновременно на два механизма: фотоиндуциран електронен пренос и вътрешномолекулен трансфер на заряд. Тази особеност на получения флуорофор е база на сензорната активност на съединението към водородни йони и действието му като молекулен рН сензор чрез “off-on-off” механизъм на генериране на флуоресцентен

сигнал. Чрез използване на разтвори с киселинен и основен характер като входни химически параметри, полученият молекулен сензор изпълнява не само логически функции (INH, XNOR, AND, XOR, NAND and OR), но и логически операции (digital comparator и half-adder). Изследвана е селективността на сензора към водородни катиони в серия буферни разтвори и в присъствие на йони на преходни метали (Co^{2+} , Cu^{2+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , Pb^{2+} , Zn^{2+} , Hg^{2+} , Ag^{+}). Резултатите показват, че новосинтезираният сензор е селективен към водородните йони в изследвания pH интервал (от pH 3 до 10) в присъствие на метални йони. Изследваните метални йони предизвикват слаб „гасящ“ ефект на флуоресцентния сигнал (под 10%). Анионният състав на използваните буфери не влияе върху чувствителността на сензора към водородни йони.

9. A. Surleva, N. Georgiev, *A new fluorescent probe for toxic cyanides sensing in aqueous media*, In: A.-V. Sandu (Ed.) European exhibition of creativity and innovation, EUROINVENT 2012, Alexandru Ioan Cuza Univ. Publ. House, Iasi, Romania, pp. 275-282 (2012), присъден златен медал в секция „Иновации“

Настоящият доклад представя резултатите от изследвания върху сензорната активност на ново синтезиано съединение, производно на нафталимид, което се отличава с добра водоразтворимост. Флуоресцентният отклик на багрилото е основано на лиганд-обменна реакция между желязо III – нафталимид и цианиден йон. В 100% водни разтвори багрилото показва силен флуоресцентен сигнал в присъствие на Fe^{3+} . При добавяне на свободен цианид или комплексно-свързан цианид ($\text{Cu}(\text{CN})_3^-$) се наблюдава „гасене“ на флуоресценцията.

10. А. Елзтаф, А. Сурлева, И. Стоева, *Определяне дебелината на живачния филм на волтамперометрични сензори*, Научни известия 3 (2000) 111-114

Разработена е методика за определяне на дебелината на живачния филм на тънкослойни волтамперометрични сензори. Изследвана е зависимостта между потенциала на отлагане и дебелината на филма и са намерени оптималните условия за получаване на сензорите.

11. Л. Илчева, А. Елзтаф, А. Сурлева, Ж. Денчев, *Живачен филмов електрод за конвенционална анодно-инверсионна волтамперометрия*, J. Univ. Chem. Techn. Metall. 34 (1999) 52-61

Предложена е опростена процедура за получаване на филмов електрод чрез отлагане на живачен филм върху никелова нишка. Живачният филм, нанесен върху чиста никелова подложка, разширява работна област от потенциали и намалява остатъчния ток. Анодно-инверсионните пикове нарастват с увеличаване на концентрацията на $\text{Cu}(\text{II})$ и калибровъчната крива е линейна в концентрационния интервал от 0.5 mg/L до 4.0 mg/L. Ширината на полупика ($b_{1/2}$, mV) е стабилна в продължение на 300 часа.

12. St. Hadjinikolova, L. Ilcheva, I. Stojanova, V. Vassilev, A. Atanassova (Surleva), *Investigations of the Analytical Characteristics of Silver (I) Ion-selective Chalcogenide Glass Electrode*, Analytical Laboratory 4 (1995) 105-107

Представени са аналитичните характеристики на сребро(I) йон-селективен електрод. Йон-селективният електрод е с активна мембрана от халкогенидно стъкло със състав $(\text{Se}_{0.4}\text{As}_{0.2}\text{Te}_{0.4})_{92}\text{Fe}_8 + 1\%\text{Ag}$ и течна вътрешна връзка. Електродната функция е линейна в концентрационния интервал: 10^{-1} до 10^{-5} М Ag^+ . Синтезираното халкогенидно стъкло показва електродни характеристики сравними с търговски йон-селективен електрод (пресована мембрана, съдържаща сребърен сулфид). Разработеният халкогениден електрод показва подобрена химическа стабилност в силно кисели разтвори.

ТЕМА 2 : АНАЛИТИЧЕН КОНТРОЛ

13. С. Вълчева-Кузманова, П. Денев, М. Крачанова, А. Сурлева, А. Белчева, *Състав и антиоксидантна активност на плодов сок от aronia melanocarpa*, Варненски медицински форум 3 (1) (2014) 15-20

Целта на настоящото изследване е да се определят концентрациите на някои биологично активни вещества и антиоксидантната активност на плодов сок от *Aronia melanocarpa*. Сокът е получен по два начина: 1) чрез центрофугиране на свежи плодове и консервиране с калиев сорбат или 2) чрез смачкване на плодовете, филтриране на сока и стерилизиране. Резултатите показват, че и двете проби са изключително богати на полифенолни съединения. Проба 1 е с по-високо съдържание на всички полифенолни съединения с изключение на антоцианините. Тя съдържа също микро количества цианогени, определени чрез спектрофотометричен метод (подробно описан в публикация 1) след киселинната им хидролиза. Разликите в състава на двете проби вероятно се дължи на различните методи за получаване и консервиране на сока.

14. G. Yonkova, V. Zhivkova, A. Surleva, *The use of fluoride containing mineral water in wort production*, Scientific Study & Research. Chemistry & Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry, 12 (4) (2011) 373-380

Представени са резултатите от изучаване качеството на пивна мъст, получена с използване на флуорид-съдържаща минерална вода. Резултатите показват, че минералната вода има негативно влияние върху ензимното разграждане на нишестето, протеиновото съдържание, интензитета на цвета и киселинността на пивната мъст. Сравнени са характеристиките на пивната мъст, получена с чешмяна и с минерална вода. Съдържанието на флуорид в готовото пиво е по-малко от 5 mg/L, когато при майшуването са използвани чешмяна и минерална вода в съотношение 1:1 и лимонена киселина за корекция на киселинността. В същото време, крайната степен на ферментация, алфа-аминният азот и цветът на получената пивна мъст са близки до контролната проба. Промените във флуоридното съдържание са проследени чрез йон-селективен потенциометричен метод. Флуоридното съдържание намалява от 5.7 до 4.75 mg/L, като най-интензивни са промените по време на майшуването.

15. G. Yonkova, A. Surleva, T. Ginova-Stoyanova, *Technology for production of fluoride enriched beer*, Journal of Chemical Technology and Metallurgy 47 (1) (2012) 53-58

Производството на „предпазващи“ храни е от особен изследователски интерес поради способността им да намаляват нивото на радиоактивно „замърсяване“ на човешкия организъм. „Предпазващите храни“ (protective foods) обикновено се създават на базата на широко разпространение и употребявани храни и напитки със специално модифициран състав за създаване на деконтаминиращи свойства. Настоящият доклад описва технология на производство на обогатено с флуорид пиво с предпазващи от радиоактивно влияние свойства. Като източник на флуорид е използвана естествена минерална вода, тъй като флуоридът от този източник има най-силна деконтаминираща активност. При производството на пиво е използвана смес 1:1 от минерална и чешмяна вода. По време на майшуването киселинността се регулира чрез добавки на лимонена киселина. Технологията на получаването на пивната мъст е описана подробно в публикация 14. Изследването представено в този доклад показва, че ферментационният процес на обогатеното с флуорид пиво протича без отклонение. По време на пивоварния процес се наблюдава намаление с 17% на флуоридното съдържание. Полученото обогатено на флуорид пиво отговаря напълно на пивоварните стандарти.

16. G. Jonkova, A. Surleva, *Impact of polysaccharides of malt on filterability of beer and possibilities for their reduction by enzymatic additives*, Journal of Chemical Technology and Metallurgy 48 (2013) 234-240

Бета-глюканите са основни компоненти на ечмичените клетъчни стени. Те представляват линейни високомолекулни полизахариди, който имат склонност да образуват гелове. Тези компоненти влияят върху вискозитета на пивната мъст и пивото, както и на качеството на пивото. Настоящото изследване има за цел получаване на пивна мъст от малц при различна степен на цитолитично разграждане и оценка на ефекта на добавена бета-глюканаза по време на ферментирането на пивната мъст. Съдържанието на бета-глюкани в лошо и добре разграден малц е съответно 1000 mg/L и 384 mg/L. Добавянето на ензимни препарати с бета-глюканазна активност при ферментацията на пивната мъст, получена от лошо разграден малц, води до намаляване на вискозитета на пивото с 5-40% в зависимост от концентрацията на ензимния препарат и намаляване на съдържанието на бета-глюкани с повече от 90%.

17. D. Stratiev, V. Yankov, I. Petrov, I. Shishkova, A. Pavlova, P. Ivanova , A. Surleva, K. Hristov, E. Todorova, K. Stanulov, A. Obryvalina, R. Telyashev, *Study of sediment formation in near zero diesel hydrotreating unit*, Fuel Processing Technology 126 (2014) 332-342 ; IF 3.019

ЛУКОЙЛ Нефтохим Бургас, единствената работеща рафинерия в България, конструира и въвежда в експлоатация нов блок за дизелова хидроочистка под високо налягане през 2010 г. Оттогава технологичната система работи безпроблемно, като третира тежки дизелови фракции (200-360°C) със съдържание на сяра 0.8% и плътност при 20 °C 0.860 g/cm³ и произвежда хидроочистен дизел със съдържание на сяра под 6 ppm и плътност при 20 °C 0.847 g/cm³. През 2013 г. обаче внезапно повишаване на

налягането на компресора от схемата за хидроочистка, нагнетяващ третиращия газ в топлообменник, предизвиква аварийно изключване на системата. След отваряне на топлообменника е установено, че тръбите от вътрешно тръбното пространство са запушени от твърда кристална маса. Това изследване има за цел определяне на състава и причините за образуване на отложения в топлообменника, както и разработване на технологични решения за предотвратяване на подобни аварии. Чрез използване на различни аналитични методи е установен следния състав на отложението: 46,6% NH_4Cl , 9,6% NO_3^- , 13,6% органични хлориди и около 30% вода, органични примеси (карбоксилни киселини и нафтонови производни) и корозионни продукти. Математичното изследване показва, че при текущите режими на работа на топлообменника се създават условия за образуване и кристализиране на амониев хлорид.

18а. Г. Йонкова, А. Сурлева, Л. Илчева, П. Бозаджиев, Йодсъдържащи функционални напитки на малцова основа, Хранителна промишленост 7-8 (2001) 13-15

На базата на технологията за производство на биологично обогатена безалкохолна напитка е създадена нова йод-съдържаща напитка „Малтина-йод“. Установено е, че функционална добавка на йод към напитката е възможна само под формата на калиев йодид. За контрол на йодидното съдържание е предложен йон-селективен метод с добра точност и възпроизводимост. Изучено е също и влиянието на функционалната добавка калиев йодид към пиво. За контрол на йодидното съдържание е предложена техниката на поточно-инжекционния анализ с йон-селективна детекция. Проследено е изменението на физико-химичните параметри на малцовата напитка и пивото след добавяне на калиев йодид. Малцовата напитка и пивото, съдържащи калиев йодид, са функционални напитки, подходящи за профилактика на йоддефицитни заболявания.

18б. G. Kabakchieva, L. Iltscheva, A. Surleva, P. Bozadjiev, Jod Enthaltende Getranke auf Malzbasis Kinetische Untersuchungen von Jodiden in Bioprodukten auf Malzbasis, Brauindustrie 11 (1999) 661-662

ТЕМА 3 ИЗСЛЕДВАНЕ НА РАВНОВЕСНИ СИСТЕМИ

19. A. Surleva, P. Atanasova, T. Kulusheva, L. Costadinova, Study of the complex equilibrium between Titanium (IV) and tannic acid, Journal of Chemical Technology and Metallurgy 49 (6) (2014)

Комплексът между титан (IV) и танин се прилага в модерната кожарска технология като екологична алтернатива на хромното дъбене и ефективна модификация на растителното дъбене. Съотношението между титан (IV) и танин в дъбилните разтвори е ключов фактор за минимизиране на неизползваните количества танин, които навлизат в околната среда чрез отпадните води и причиняват щети на

водните екосистеми. Това изследване има за цел охарактеризиране на титанил-танин комплекса: структура, стехиометрия и стабилитетна константа. Представени са и данни за коефициента на страничната реакция на образуване на титанил-хидроксо комплекс. Получените резултати показват, че в концентрационния интервал $5 \times 10^{-6} - 2 \times 10^{-5}$ М Ti(IV) и рН 4 във водни разтвори, съдържащи титанил йон/танин/натриев формиат, преобладава комплекса титанил-хидроксо-танин със състав TiO(OH)TA. Резултатите от UV-Vis и IR спектрометрия показват, че комплексообразуването с TiO^{2+} се осъществява чрез кислородните атоми от Ar-C=O и от фенолните групи на таниновата молекула. Определена е стабилитетната константа на комплекса: $\lg \beta = 16,53$. Получените по метода на молните отношения криви на насищане и изчислените равновесни концентрации могат да бъдат използвани в кожарската технология за оптимизиране на състава на дъбилните разтвори.

20. L. Nikolova, A. Surleva, T. Hedeltcheva, R. Borissova, *Algorithm for spectrophotometric study of 1:1 stoichiometric complexes at overlapped spectra of the complex and the ligand*, Journal of Chemical Technology and Metallurgy 46 (2011) 203-208

Разработен е опростен алгоритъм за определяне на стабилитетни константи от спектрофотометични данни при напълно припокриващи се спектри на лиганда и комплекса. Методът за изчисляване на стабилитетната константа е основан на закона за действие на масите и мултивариантен регресионен анализ. Не се използват специализирани програми, а регресионни функции, включени в повечето статистически програми. Предложеният алгоритъм не изисква начални допускания за стойността на стабилитетната константа. Валидността на алгоритъма е проверена чрез изследване на системата бисмут-ПАР (ПАР = 4-(2—пиридилазо) резорцинол).

21. T. Nedeltcheva, A. Surleva, L. Nikolova, R. Borissova, S. Georgieva, *Spectrophotometric study of competitive complexation equilibria involving overlapped spectral responding species: Determination of the stability constant of bismuth-pyrophosphate complex*, Central European Journal of Chemistry 10 (2012) 1875-1881; IF 0.973

Представеният в публикация 20 алгоритъм определяне на стабилитетни константи от спектрофотометични данни при напълно припокриващи се спектри на лиганда и комплекса е разширен и приложен за изследване на конкуриращи се комплексообразователни равновесия с припокриващи се спектри на участващите компоненти. Разработеният алгоритъм позволява едновременно определяне на стабилитетните константи и стехиометрията на получените комплекси. Представени са концентрационните профили и коефициентите на страничните (конкуриращите) реакции. Неабсорбиращата система бисмут-пирофосфат (Bi-PPh) е изучена чрез проследяване на влиянието ѝ върху абсорбираща система бисмут-пирофосфатрезорцинол. Доказано е образуването на Bi-PPh комплекс със стехиометрия 1:1 в концентрационната област: $C_{Bi} = 1 \times 10^{-5}$ М; $C_{PPh} = 5 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-4}$ М с условна стабилитетната константа при рН=1 и $\mu = 1.0$: $\log \beta = 4.2 \pm 0.2$.

22. D. Tsekova, E. Makakova, P. Alov, G. Gornev, I. Pajeva, L. Tancheva, V. Petkov, A. Surleva, B. Escuder, J. Miravet, E. Katz, *Structure-activity relationships of new L-valine derivatives with neuropharmacological effects*, Bulgarian Chemical Communications 41 (2009) 133-137; IF 0.3

Изследвана е фармакологичната активност на 4 нови производни на L-ванилина. Представени са експериментални данни за тяхната разтворимост, определени са протолитните им константи, коефициента на разпределение logP.

тема 4: КАЧЕСТВО НА ОБУЧЕНИЕТО

23. A. Surleva, S. Terzieva, N. Penkova, *An effective environment for specialized education of young researchers – a satisfaction feedback*, Eds: E. Klein, B. Koumanova, S. Nedev, G. Elenkov, D. Milcheva, *Proceedings of the Anniversary Scientific Conference with International Participation “60 Years UCTM”, June 5-6 2013, UCTM, Sofia, Bulgaria, 2013, 101-105*

В тристепенната структура на висшето образование се диференцират специфични цели на подготовката, като за най-високото ниво 8 – докторантурата, те определят и най-висока степен новост на знания, способност за творчество в определена сфера, както и в допирни точки между на научни изследвания. В модела на компетентности за докторантите се включват: поемане на отговорност, независимост, принос към професионалните познания и практика, както и умения за екипна работа. В новоизградената структура за обучение на докторанти и млади учени в ХТМУ: Център по математично моделиране и компютърна симулация (ЦММКС), се развиват нови форми и съдържание на подготовка, създават се условия за индивидуално планиране на учебна работа и представяне в по-широка научна и професионална среда. За ефективно организиране на обучението се провежда изследване на потребностите, нагласите и самооценките за напредъка на обучаемите. В серия от анкети се получава обратна връзка и резултатите се анализират по профил на изследователя, развитие на компетентности, напредък и удовлетвореност от обучението. Данните от начално и текущо анкетиране показват, че обучението и дейностите в ЦММКС подпомагат съвместната работа в интердисциплинен контекст и се отразяват положително върху разработването на конкретни професионални задачи. Изследването и анализите са направени с първия курс от 33-ма млади изследователи.

НАУЧНИ И НАУЧНО-ПРИЛОЖНИ ПРИНОСИ:

1. РАЗРАБОТВАНЕ НА ХИМИЧНИ СЕНЗОРИ И АНАЛИТИЧНИ МЕТОДИ

1.1. Разработен е спектрофотометричен метод за определяне на цианогени, свободен и комплексно свързан цианид, с използване на нинхидрин като фотометричен реактив. Методът е бърз, селективен, чувствителен, провежда се при стайни условия, използва евтини и нетоксични реактиви. (Публикации 1,2,3,4,13)

1.2. Разработени и валидирани са хроматографски методи с флуоресцентна и мас-спектрометрична детекция за определяне на хинолони в хранителни продукти. За пръв път се предлага методика за екстракция и разделяне на хинолоните, която е ефективна и за деветте анализа в шестте изследвани матрици (описани в европейските директиви), и е съвместима с флуоресцентна и мас-спектрометрична техника за детекция. (Публикации 5,6)

1.3. Разработен е молекулен флуоресцентен сензор с функции на логическо устройство, основани на съчетанието от химически и спектрални параметри. Основен принос е дизайнът на водоразтворимо флуоресцентно багрило, което запазва сензорната си активност във водни разтвори. (Публикации 8,9)

1.4. Разработен е йон-селективен метод за конвенционално и поточно-инжекционно определяне на йодид в йодирани напитки. (Публикации 7,18)

1.5. Разработени са електрохимични сензори за определяне на тежки метали. (Публикации 10,11,12)

2. АНАЛИТИЧЕН КОНТРОЛ

2.1. Установен е състава на отложение в топлообменник от технологичната линия за производство на горива. Получените аналитични резултати позволиха идентифициране на източниците на хлоридно замърсяване и разработване на програма за предотвратяване на аварии в ЛУКОЙЛ Нефтохим Бургас. (Публикация 17)

2.2. Разработването на модифицирани пивоварни технологии е тясно свързано с резултатите от текущия аналитичен контрол. Използвани са стандартни методи за анализ на пиво и разработени методики за контрол на флуоридното и йодидното съдържание. (Публикации 14-16).

3. ИЗСЛЕДВАНЕ НА РАВНОВЕСНИ СИСТЕМИ

3.1. Охарактеризиран е състава на титанил-таннин комплекса с приложения в дъбилната технология. За пръв път са представени количествени данни за стабилността и състава на комплекса. Предложените диаграми позволяват бърз избор на състава на дъбилните разтвори. (Публикация 19)

3.2. Разработен е опростен алгоритъм за изучаване на комплексобразователни равновесия от спектрофотометрични данни в системи с припокриващи се спектрални характеристики. (Публикации 20,21)

3.3. Определени са киселинните константи на новоситензирано съединение с биологична активност. (Публикация 22)

4. КАЧЕСТВО НА ОБУЧЕНИЕТО

4.1. Разработена е методика и въпросници, проведено е анкетно проучване сред участниците в целевата група на Център по математично моделиране и компютърна симулация към ХТМУ: докторанти, пост-докторанти и млади учени, за проучване на интересите и удовлетвореността. Подобна дейност за контрол на качеството на обучението се прилага за пръв път сред участници по ОПРЧР, Схема: Подкрепа на развитието на докторанти, пост-докторанти и млади учени. (Публикация 23)