

вх. № РД-08-98/06. 02. 2017 г.

Тема: ” Теоретични, експериментални и методологични изследвания в химията ”

Финансиране 4070.72 лв.

### ЕКИП

Ръководител на проекта:	Преподавател/докторант/ студент
1. Проф. дхн Валерий Христов Христов	Преподавател
Членове на колектива:	
2. Проф. дхн Добромир Димитров Енчев	Преподавател
3. Проф. д-р Христомир Йорданов Христов	Преподавател
4. Хон. Проф. дхн Иван Петков Бангов	Преподавател
5. Prof. Dr. Toгу Minami	Преподавател
6. Доц. д-р Петинка Радева Галчева	Преподавател
7. Доц. д-р Ивайло Кънчев Иванов	Преподавател
8. Доц. д-р Радка Томова Георгиева-Николова	Преподавател
9. Доц. д-р Марина Николаевна Московкина	Преподавател
10. Доц. д-р Петя Николаева Петкова	Преподавател
11. Гл. ас. д-р Ивайло Дианов Парушев	Преподавател
12. Гл. ас. д-р Исмаил Ефраимов Исмаилов	Преподавател
13. ас. д-р Диляна Стефанова Иванова	Преподавател
14. Ас. д-р Мирослав Георгиев Дангалов	Преподавател
15. Ас. Хасан Хасанов Хасанов	Преподавател/докторант/
16. ас. Станислав Андреев Дончев	Преподавател/докторант/
17. ас. Ренай Рафет Рафи	Преподавател
18. Антоанета Иванова Хинева	учител
19. Павлина Миткова Косева	лаборант
20. Миглена Петкова Славова	докторант
21. Ивайло Стефанов Трайков	докторант
22. Ирина Руменова Йотова	докторант
23. Богдана Любомирова Любенова	Студент маг. програма
24. Емине Ибрямова Мустафова	Студент маг. програма

### ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

По работен пакет № 1:

На базата на добре-валидирана методология и в сътрудничество с колегите от *BRGM* (Френското Геологично Общество) Dr. A. Lassin, Dr. L. Andre, and Dr. A. Lauch са конструирани нови модели без концентрационни ограничения за следните бинерни нитратни системи:

А)  $[\text{HNO}_3\text{-H}_2\text{O}, \text{NaNO}_3\text{-H}_2\text{O}, \text{KNO}_3\text{-H}_2\text{O}, \text{Mg}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}, \text{and Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}]$ , and

В ) за всички Радио-Нуклеидни системи за които са достъпни експериментални данни за активностите:

1. incl all 14 Lanthanide metals (La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Pr(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Nd(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Pm(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Sm(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Eu(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Gd(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Tb(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Dy(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Ho(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Er(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Tm(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Yb(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, Lu(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O)
2. and Actinides (Th(NO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> -H<sub>2</sub>O, UO<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O)..

*По работен пакет № 2:*

В рамките на работния план на вторият пакет бяха проведени подготвителни работи по създаване на масиви данни за група белите вина тип vinho verde от Португалия, район Minho. За избраната група (4898 броя обекти) ние разполагаме с данни от рутинни лабораторни тестови анализи - числови стойности, които ние използвахме като дескриптори за фингърпринтен анализ.

От налични данни беше изработен числов масив ( формат \*.xls) от 4898 бр обекта и 11 свойства (дескриптори). Създадените масиви данни се използват за генериране на дескрипторни пръстови отпечатащи за всеки един изследван обект. С това първият междинен резултат (M1) е постигнат в нормален срок.

През първи етап от работата са изработени дескрипторни файлове и от тях понастоящем се работи по създаване на клъстерни групи. Обединяването в общи клъстери става чрез търсене на подобие с помощта на генерираните дескрипторни пръстови отпечатащи.

Изчисленията се извършват много бавно предвид огромно количество анализирани обекти в групата. Предстои анализиране и характеризиране на генерираните клъстери чрез допълнителни математически обработки. При успешно обединяване на обекти в общи клъстери ще се създаде възможност за анализиране на всяка отделна група и създаване на нови фингърпринти – този път за всеки отделен клъстер. Подобни пръстови отпечатащи се създават чрез подхода на размитата логика (fuzzy) и се наричат fuzzy-фингерпринти.

*По работен пакет № 3:*

В първия етап на работния план на пакет „Кластерен анализ на клиничните данни при заболявания на щитовидната жлеза“:

- бяха проведени срещи с водещи ендокринолози от Александровска болница за уточняване на клиничните показатели, определящи състоянието на болни с различни болести на щитовидната жлеза.
- Уговорено е събирането на кръвни проби за анализ на селен и ползването на апарат за Атомно-абсорбционен анализ във ФХФ на СУ „Климент Охридски“. Беше уточнен начинът за вземане на кръвните проби, за обработването и съхраняването им.
- Събрани са данни от малък брой нелекувани пациенти с доказано заболяване, които да се използват като сравнителна група. Пациентите са на Ендокринологията на Военномедицинска академия.

- Продължава търсенето на данни от такива пациенти за попълване на масивите от данни.
- От наличните данни се прави подбор на параметрите за кластерен анализ въз основа на тяхната вариабилност.

*По работен пакет № 4:*

Извършена е пълна литературна справка за реакцията на съответните алкиноли с хипофосфориста киселина и евентуална следваща ацетилен-аленова изомеризация до аленфосфинови киселини, които да бъдат използвани като субстрати в реакциите с електрофилни реагенти. В резултат от изпълнението на задачите, включени в работен пакет 4 са придобити знания и умения за синтез и охарактеризиране на аленфосфинови киселини, както и на продукти от техни взаимодействия с електрофилни реагенти.

*По работен пакет № 5:*

Получена е библиотека от новосинтезираните 3-( $\alpha$ - и  $\beta$ -хидроксиалкил)-заместени аленфосфонати и аленил фосфин оксиди и са изследвани реакциите на циклизация при взаимодействието с различни електрофилни реагенти и в присъствието на катализатор метална сол.

*По работен пакет № 6:*

Синтезирани са серия от 1,1,3-трифункционализирани алени със защитена хидрокси, естерна и фосфонатна или фосфиноксидна групи и е изучена реакционната им способност с електрофилни реагенти и в присъствието на катализатор метална сол.

*По работен пакет № 7:*

В изпълнение на **задача 1: Създаване на методическа система за интерактивно обучение в 9. и 10. клас на СУ** са разработени система от уроци с използване на проектно обучение, интерактивна дъска и тестове за електронна дистанционна проверка на знанията на учениците.

Резултатите са представени на XV Национална конференция с международно участие „Природни науки'2017” и на 47-ма Национална конференция на учителите по химия.

**Задача 2. Изследване и оценка на образователната атмосфера в гимназиалното образование и ФПН с помощта на хемометричен подход**

Проведено е анкетно проучване с 420 ученика от 9,10 и 11 клас. Получените резултати са систематизирани, групирани и обработени с помощта на кластерен анализ и анализ на главни компоненти. Резултатите са представени на XIV International conference The Power of Knowledge, Солун, Гърция, 28.09.-01.10.2017 г.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО ПРОЕКТА

1. Z. Mustafa, M. Moskovkina, R. Milina, I. Bangov, Use of Descriptor fingerprints to similarity and clustering analysis of biodiesel fuels on the basis of their composition

- and properties. Introduction of fuzzy descriptor fingerprints, *IJSER*, 2017, 8 (3), 1720-1738.
2. Hasanov, H. H; Ivanov, I. K.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized Allenes. Part XIX. Synthesis, Electrophilic Cyclization/Addition and Coinage Metal-Catalyzed Cycloisomerization of Phosphorylated 3-( $\beta$ -Hydroxy)allenes, *Heteroatom Chem.* **2017**, 28, e21357, 1-10.
  3. Hasanov, H. H; Ivanov, I. K.; Christov, V. Ch. Bifunctionalized Allenes. Part XX. A Convenient and Efficient Regioselective Synthesis of Phosphorylated 3-( $\alpha$ -Hydroxyalkyl)allenes, *Bulg. Chem. Commun., Special Edition B* **2017**, 49, 25-32.
  4. Ismailov, I. E.; Ivanov, I. K.; Christov, V. Ch. Trifunctionalized allenes. Part I. A Convenient and Efficient Regioselective Synthesis of 4-Phosphorylated 5-Hydroxyalka-2,3-dienoates, *Bulg. Chem. Commun., Special Edition B* **2017**, 49, 33-41.
  5. V. K. Brel', E. Yu. Kovaleva, D. D. Enchev, *Russ. J. Gen. Chem.*, **2017**, 87, No. 8, 1731-1736.
  6. Gergana Alexieva, Petya Petkova, Piiyan Kolev, Ismail Ismailov, Anna Amova, Venceslav Vassilev, Vesselin Strashilov, Mid-infrared optical spectra of chalcogenide glasses from the system  $As_2Se_3\{Ag_4SSe\{PbTe}$ , *Докл БАН*, **2017**, 70, 1501-1508.
  7. Petya Petkova, Gergana Alexieva, Anna Amova, Petko Vasilev, a study of optical microscopic parameters of chalcogenide glasses from the system  $As_2Se_3-Ag_4SSe-PbTe$ , *Докл БАН*, **2017**, 70, 489-496.
  8. P. Petkova, Magneto-optical investigation of  $MgSO_3 \cdot 6H_2O$  with polarized light, *Physica B* **2017**, 522, 39-42.
  9. Miglena P. Slavova, Radka T. Georgieva-Nikolova, Mariana M. Nikolova and Radka K. Hadjiolova. Quartz crystal microbalance-based unlabeled immunosensor for the determination of aflatoxin B1. *Bulg. Chem. Commun.*, **2016**, 48 (4), 689-693.
  10. D. Ivanova, J. Angarska, E. Manev, K. Tachev „Critical thickness of foam films stabilized by nonionic or ionic surfactants and their mixtures” *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* vol.519 (**2017**) 34–45.
  11. M. Slavova, R. Georgieva-Nikolova, H. Hristov, M. Nikolova, Covalent immobilization of antibodies onto the poly-acrylamide-acrylonitrile as well as hybrid material UREASIL and creation of optical immunosensor for determination of aflatoxin B1, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 52-56.
  12. Traykov I., P. Galcheva Implementing Interactive Teaching Methods for 9th Grade Organic Chemistry Classes, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 118-123.
  13. Enchev, Dobromir D., Synthesis and properties of N-alkyl(phenyl)amido-O-methyl-1,2-alkadienephosphonates, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 6-12.
  14. Enchev, Dobromir D., Interaction of 1,2-Alkadienephosphonic thioesters with sulphenyl- and selenenylbromide Enchev, Dobromir D., *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 13-18.
  15. I .P. Bangov, M. Moskovkina, B. P. Stojanov, Descriptor Fingerprints and Their Application to Red Wine Clustering and Discrimination, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 29-33.
  16. P. Petkova, P. Vasilev, B. Bedzhev, R. Belcheva, Mazer's theory application in  $Bi_4Ge_3O_{12}:V$ , *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 57-60.
  17. Albena Merdzhanova, Ivaylo Ivanov, Diana A. Dobрева, Lyubomir Makedonski, Fish Lipids as a Valuable Source of Polyunsaturated Fatty Acids, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 70-75.

18. Darina Bachvarova, Renay Rafi, Aleksandar Doichinov, The Impact of Environmental Factors on the Amount of Nitrates and Nitrites in Different Types of Soils and Ways of Their Utilization, *Acta Scientifica Naturalis*, **2017**, 4, 100-105.
19. Radka Tomova, Petinka Galcheva, Ivajlo Trajkov. Perception of the educational environment by students of Business School “Georgi Stojkov Rakovski”-Varna, *International Journal Knowledge*, **2017**, 17.2, 713-718.
20. Трайков И., А. Хинева, П. Галчева Възможности на проектната дейност за формирането на ключови компетентности в обучението по химия и опазване на околната среда, Сборник с доклади от Национална конференция с международно участие „Природни науки ‘2017””, 171 -175..
21. Ismailov, I.; Ahmedova, M.; Adem, S.; Ivanov, I.; Christov, V. Phosphorylated alfa- and beta-Hydroxyallenes – Reactions of Cycloisomerization, Сборник с доклади от XV Национална конференция с международно участие „Природни науки’2017“, 2017, 20-27.
22. Ismailov, I.; Adem, E.; Yumerova, Dzh.; Ivanov, I.; Christov, V. Phosphorylated alfa-Hydroxyallenes - Reactions with Electrophilic Reagents, Сборник с доклади от XV Национална конференция с международно участие „Природни науки’2017“, 2017, 28-35.
23. Parushev, I.; Velikova, K.; Parvanova, K.; Ivanov, I.; Christov, V. Study on Electrophilic Reactions of 4-Phosphorylated Allenecarboxylates, Сборник с доклади от XV Национална конференция с международно участие „Природни науки’2017“, 2017, 36-40.
24. Ivanov, I.; Gocheva, D.; Dineva, K.; Christov, V. New Synthetic Approach to Heterocyclic Compounds from Vinylallenyl Phosphine Oxides, Сборник с доклади от XV Национална конференция с международно участие „Природни науки’2017“, 2017, 41-46.
25. Ирина Йотова, Добромир Енчев, Междумолекулна реакция на Pauson-Khand, Сборник с доклади от XV Национална конференция с международно участие „Природни науки’2017“, 2017, 13-19.
26. S. Guignot, A. Lassin, C. Christov, L. André, A. Lach, P. Henocq, LANTHANIDES AND ALKALINE/EARTH ALKALINE METALS NITRATES SYSTEMS: MODELLING OF THEIR AQUEOUS PROPERTIES AND SOLUBILITY AT 25°C, 6th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Session C - Geochemical and transport modeling, 10-15, September, 2017, Barcelona, Spain (Abstract Created ID:1161).
27. Tomova R., P. Galcheva I. Trajkov, Perception of the educational environment by students of Business school “Georgi Stojkov Rakovski ” – Varna, XIV International conference The Power of Knowledge, Солун, Гърция, 28.09.-01.10.2017 г.
28. Hineva A., P. Galcheva Using Project Based Learning in the “Thermochemistry” Topic – example from education practice, XV Национална конференция с международно участие Природни науки ’2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
29. Galcheva P., I. Traykov The game as an interactive method in teaching chemistry and environmental education in grade 7, XV Национална конференция с международно участие Природни науки ’2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
30. Galcheva P., R. Vladeva, P. Russeva, E. Dimova, An Opportunity to form skills supporting development with the help of out-of-class environment, XV Национална конференция с международно участие Природни науки ’2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
31. Vladeva R., P. Galcheva Methodological aspects on training in natural sciences in Shumen University, XV Национална конференция с международно участие

- Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
32. Трайков И. А. Хинева, П. Галчева Възможности на проектната дейност за формирането на ключови компетентности в обучението по химия и опазване на околната среда, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  33. Трайков И. , А. Хинева, П. Галчева Възможности за формиране на умения за подкрепа на устойчивото развитие и за здравословен начин на живот и спорт с помощта на проектна дейност при обучението по ХООС в 11 клас, 47-ма Национална конференция на учителите по химия, 27-29.10.2017 г. Благоевград.
  34. Marina Moskovkina, Borislav Stoinov, Ivan P. Bangov, Some New Results of Using Descriptor Fingerprints, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  35. Laurent André, Christomir Christov, Arnault Lassin, Mohamed Azaroual, Behavior of Al(III), Fe(III) and Cr(III) in Saline Solutions. A Pitzer Approach-based Thermodynamic Model for Solution Behavior and Solid-liquid Equilibrium in Na-Al(III)-Fe(III)-Cr(III)-Cl-H<sub>2</sub>O System at 25°C, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  36. Hasan H. Hasanov, Bogdana L. Liubenova, Ivaylo K. Ivanov, Valerij Ch. Christov, Synthesis, Reactions of Electrophilic Cyclization and Cycloisomerization of Phosphorylated 3-( $\alpha$ - or  $\beta$ -Hydroxyalkyl)allenes, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  37. Stanislav A. Donchev, Daniel Kushev, Nicolay Dodoff, trans-Dichlorotetrakis(methanesulfonic Acid Hydrazide-N<sub>2</sub>)iron(II). A Combined Application of *ab initio* Quantum Chemical Optimization and X-ray Powder Diffraction to Deduce its Molecular and Crystal Structure, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  38. Irina R. Yotova, Dobromir D. Enchev, Intermolecular Reaction of Pauson-Khand, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  39. Ismail Ismailov, Merve Ahmedova, Sabrie Adem, Ivaylo Ivanov and Valerij Christov, Phosphorylated  $\alpha$ - and  $\beta$ -Hydroxyallenes – Reactions of Cycloisomerization, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  40. Ismail Ismailov, Esin Adem, Dzheilyan Yumerova, Ivaylo Ivanov and Valerij Christov, Phosphorylated  $\alpha$ -Hydroxyallenes - Reactions with Electrophilic Reagents, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  41. Ivaylo Parushev, Kostadinka Velikova, Kameliya Parvanova, Ivaylo Ivanov, Valerij Christov Study on Electrophilic Reactions of 4-Phosphorylated Allenecarboxylates XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.
  42. Ivaylo Ivanov, Daniela Gocheva, Kornelia Dineva, Valerij Christov, New Synthetic Approach to Heterocyclic Compounds from Vinylallenyl Phosphine Oxides, XV Национална конференция с международно участие Природни науки '2017, Варна, 29.09.-01.10. 2017.