

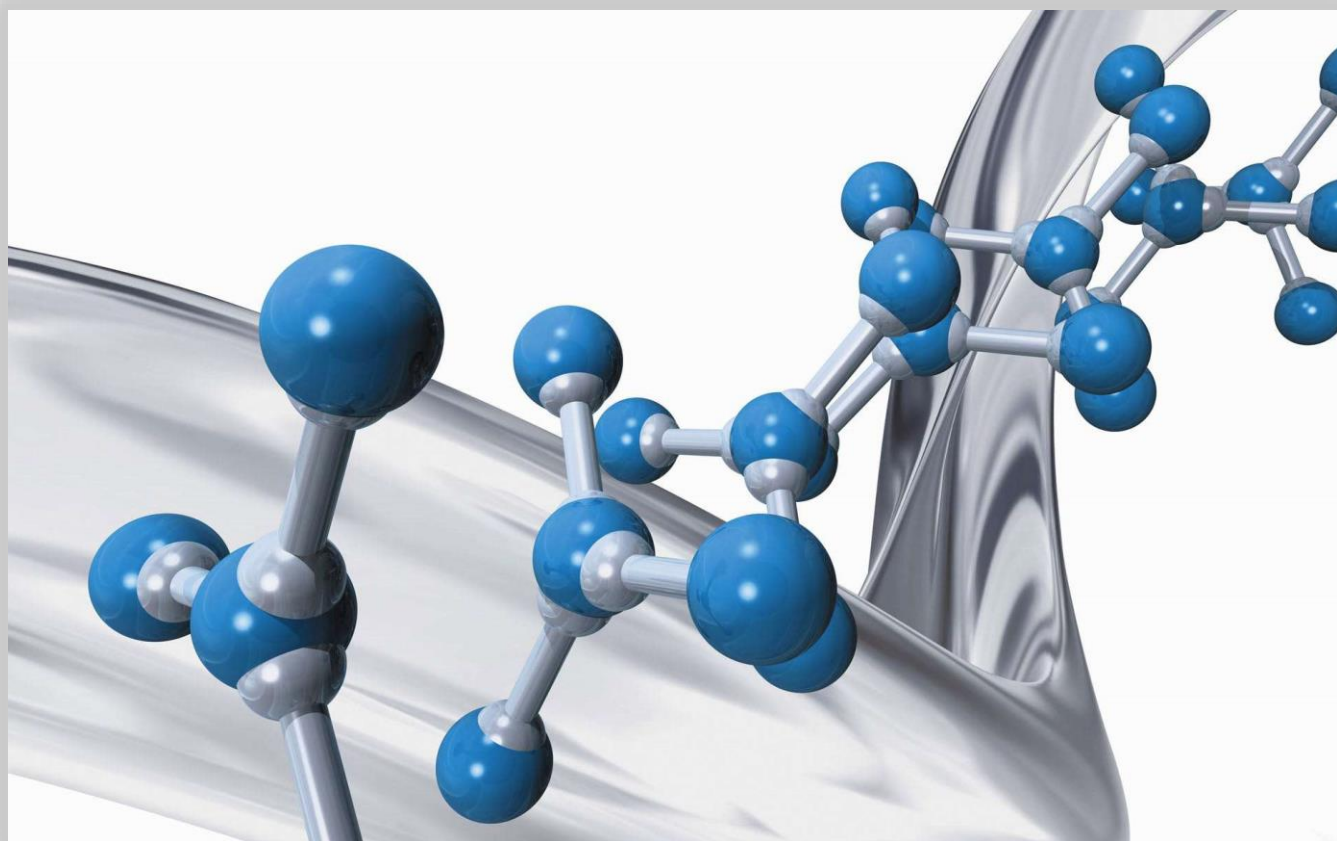


 Химически Факултет



## ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ

29 Май 2018 г.



**thermo**  
scientific

Authorized Distributor



**MILESTONE**  
HELPING  
CHEMISTS



Фирма АСМ2 ЕООД предлага доставка, инсталиране и сервизно обслужване на аналитична и измервателна апаратура, доставка на лабораторни консумативи и аксесоари, както и обучение на клиенти в теоретичен и практически аспект, разработване, валидиране и внедряване на конкретни методи за анализ и др.

АСМ2 ЕООД е оторизиран дистрибутор за България на Thermo Scientific – част от Thermo Fisher Scientific, водещ световен производител на инструментална лабораторна техника. Основните групи продукти на Thermo Scientific, са:

- **Хроматографска апаратура:** Газхроматографски (GC), Йонно-хроматографски (IC) и Високоэффективни течно-хроматографски системи (HPLC) с различни конфигурации. Хроматографски колони и консумативи, системи за пробоподготовка и аксесоари;
- **Масспектрометрия:** Масспектрометри за хроматографски апарати (GC/MS и LC/MS), магнитносекторни, изотопни и мултиколекторни масспектрометри;
- **Апаратура за спектрален анализ:** UV/VIS спектрофотометри, Инфрачервени и Раман спектрометри, ЯМР спектроскопи, NanoDrop спектрофотометри;
- **Апарати за елементен анализ:** Атомно-абсорбционни спектрометри, ICP и ICP/MS спектрометри за определяне на елементен състав в различни матрици, Елемент анализатори, Автоматизирани дискретни анализатори за колориметрични, ензимни и електрохимични измервания;
- **Рентгено-структурен анализ:** Рентгено-флуоресцентни (XRF), рентгено-дифракционни (XRD) и оптико-емисионни (OES) спектрометри;

- 🇷🇺 Сканиращи и трансмисионни електронни микроскопи (TEM/SEM);
- 🇷🇺 Апаратура за анализ на повърхности;
- 🇷🇺 Лабораторни информационни системи, LIMS.

АСМ2 ЕООД е оторизиран представител за България и на следните фирми:

- ✓ **Milestone Srl** – Микровълнови системи за пробоподготовка и живачни анализатори;
- ✓ **Elga LabWater** – Системи за пречистване на вода;
- ✓ **Erweka GmbH** – Тестери за фармацевтичен анализ и развойна дейност;
- ✓ **PEAK Scientific** – Газ генератори за азот, водород и въздух;
- ✓ **LabTech Srl** – Общо лабораторно оборудване;

От м. Февруари 2004 г. във фирма **АСМ2** е внедрена и сертифицирана система за управление на качеството съгласно изискванията на стандарт ISO 9001. Считано от 08.01.2018 г. фирма АСМ2 ЕООД успешно премина сертификация по версията на стандарта ISO 9001:2015.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**ПРОГРАМА**

|  |  |
|--|--|
| <b>08<sup>45</sup> – 09<sup>15</sup></b> | <b>Регистрация</b>   |
| <b>09<sup>15</sup> – 09<sup>30</sup></b> | <b>Откриване на семинара</b><br><i>проф. д-р Запрян Козлуджов, Ректор на ПУ „Паусий Хилендарски“</i><br><i>Андон Минков, Управител на АСМ2 ЕООД</i><br><i>доц. д-р Веселин Кметов, Декан на ХФ при ПУ „Паусий Хилендарски“</i> |
| <b>09<sup>30</sup> – 10<sup>15</sup></b> | <b>Целеви и нецелеви решения за скрининг на остатъчни вещества в околната среда и храните</b><br><i>Mr. Frans Schoutsen, Thermo Fisher Scientific</i>  |
| <b>10<sup>15</sup> – 11<sup>00</sup></b> | <b>Методи за мултикомпонентен анализ на остатъчни вещества, чрез тройноквадруполна масспектрометрия.</b><br><i>Dr. Michal Godula, Thermo Fisher Scientific</i>   |
| <b>11<sup>00</sup> – 11<sup>30</sup></b> | <b>Кафе пауза</b>  |
| <b>11<sup>30</sup> – 12<sup>00</sup></b> | <b>Ролята на масспектрометрията в персонализираната медицина, П4 приложения.</b><br><i>Проф. Добрин Свинов, Александровска болница София</i>   |
| <b>12<sup>00</sup> – 12<sup>45</sup></b> | <b>Опростяване на методите за определяне на органични замърсители в проби от околната среда. Предимства на технологията за микровълнова екстракция.</b><br><i>Mr. Valerio Rindone, Milestone Srl.</i>                          |
| <b>12<sup>45</sup> – 14<sup>00</sup></b> | <b>Обяд</b>  |
| <b>14<sup>00</sup> – 14<sup>45</sup></b> | <b>Процесът на микровълново разлагане на метали и анализът на остатъци от метали: първа стъпка към максималното увеличение на ефективността на вашия елемент-анализатор.</b><br><i>Mr. Valerio Rindone, Milestone Srl.</i>     |
| <b>14<sup>45</sup> – 15<sup>15</sup></b> | <b>Охарактеризиране на наноматериали чрез масспектрометрия с индуктивно свързана плазма – възможности и предизвикателства</b><br><i>Д-р Д. Георгиева, Химически факултет, ПУ „Паусий Хилендарски“</i>                          |
| <b>15<sup>15</sup> – 15<sup>30</sup></b> | <b>Дискусия</b>  |
| <b>15<sup>30</sup> – 17<sup>30</sup></b> | <b>Постерна сесия</b>  |
| <b>16<sup>00</sup> –</b>                 | <b>Коктейл</b>   |

## **Организационен комитет:**

*Председател:*

*Доц. д-р Веселин Кметов – Химически факултет ПУ*

*Членове:*

*Д-р Христо Йорданов – АСМ2*

*Доц. д-р Кирил Симитчиев – Химически факултет ПУ*

*Гл. ас. д-р Деяна Георгиева – Химически факултет ПУ*

*Гл. ас. д-р Евелина Върбанова – Химически факултет ПУ*

*Гл. ас. д-р Галя Тончева – Химически факултет ПУ*

## **Научен комитет:**

*Председател:*

*Проф. д-р Гинка Антова Зам. декан на ХФ*

*Членове:*

*Проф. дн Васил Делчев – Катедра ФХ*

*Доц. д-р Петя Маринова – Катедра ОНХ с МОХ*

*Доц. д-р Веселин Кметов – Декан на Химически факултет*

*Доц. д-р Виолета Стефанова – Зам. декан на ХФ*

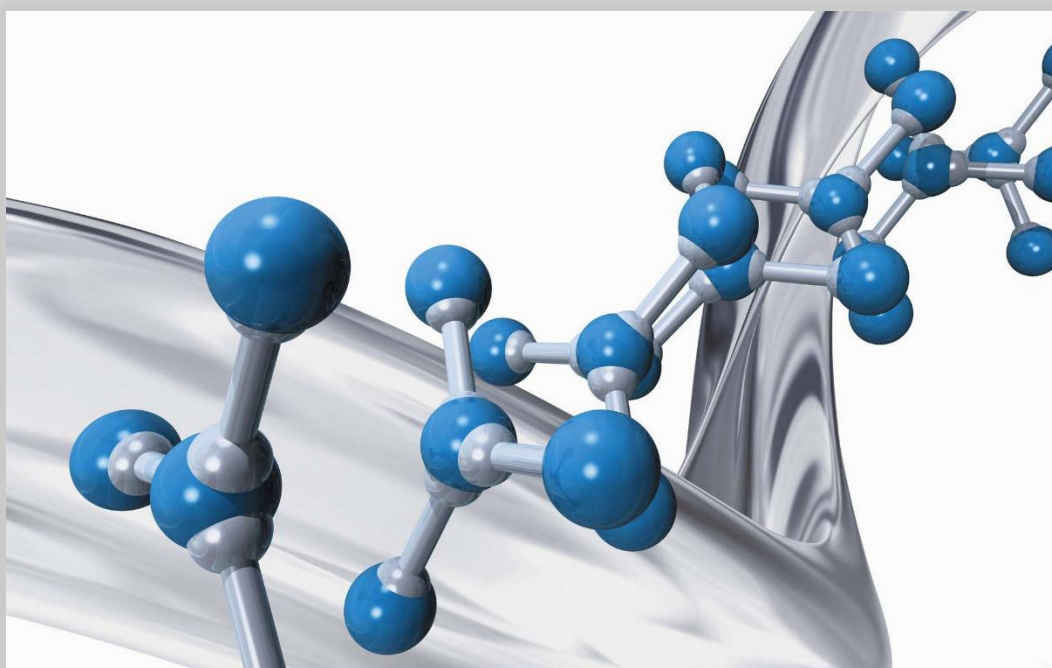
*Доц. д-р Стела Статкова-Абегхе – Катедра ОХ*

*Доц. д-р Георги Патронов – Катедра ХТ*



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ - ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **ЛЕКЦИИ**





**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **TARGETED AND NON-TARGETED SCREENING SOLUTIONS FOR RESIDUES IN ENVIRONMENT AND FOOD**

Frans Schoutsen

Thermo Fisher Scientific, Netherlands,  
frans.schoutsen@thermofisher.com

The occurrence of chemical residues and contaminants in food and environment is of a major concern both from public as well as regulatory agencies around the world. Effective monitoring of the large groups of possible contaminants and residues is therefore required. Although in most existing studies, multi-analyte methods are employed, typically only one group of the above hazardous compounds was targeted.

In last decade the High Resolution Accurate Mass (HRAM) spectrometry has gained popularity and started replacing traditional MS/MS technology. The main reasons are simple use, high analyte coverage and option of screening unknowns, in addition to the routine quantitation and confirmation in one run. In the presentation, the principles of Orbitrap™ mass spectrometry will be discussed along with the newest trends, possibilities and challenges in data evaluation of both targeted and non-targeted assays.

Main emphasis will be put on the techniques of advanced data mining, using state-of-the-art software tools such as Compound Discoverer™, data interpretation and explanation of trends.







**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **HYPHENATED MULTI-RESIDUE ANALYSIS METHODS USING TRIPLE-QUADRUPOLE MASS SPECTROMETRY**

Michal Godula, PhD.

Thermo Fisher Scientific, Czech Republic,  
michal.godula@thermofisher.com

The analysis of a range of contaminants in various food or environmental samples has become an urgent issue in recent years. Polar pesticides such as glyphosate and glufosinate have become very popular in the agricultural practice due to their excellent herbicidal properties. Range of other pesticides is being used and routinely detected as well as range of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs). There are of course concerns about potential adverse effects of these substances on human health. Detection limits in range of  $\mu\text{g/L}$  down to  $\text{pg/L}$  need to be achieved in some cases.

Recent developments in hyphenated chromatography and mass spectrometry offer many advantages especially for the analysis of organic substances at very low concentration levels. Online sample preparation, direct injection of large volumes offer possibility to achieve extremely low detection limits in a variety of water samples. Ion chromatography as the preferred separation technique for polar ionic substances, such as anions, cations and small polar molecules offers additional value coupled to triple quadrupole mass spectrometry and offers very low detection limits and robustness for routine applications.

The aim of the presentation is to describe the possible alternative methods including online SPE, large volume injection and IC-MS/MS for direct analysis of polar and non-polar substances in water and food samples and to assess the applicability of the method in routine practice.





**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**КЛИНИЧНАТА МАС СПЕКТРОМЕТРИЯ КАТО  
ПЛАТФОРМА НА ПЕРСОНАЛИЗИРАНАТА МЕДИЦИНА**

Добрин А. Свиначов

*УМБАЛ „Александровска“ ЕАД, МФ, МУ – София*

В клиничната медицина навлизат бурно нови технологии, които съществено променят облика ѝ. Технологичният трансфер се води от мас спектрометрия, геномни изследвания и платформи за клетъчно сортиране, които трасират пътя на индивидуализирания подход към пациента. Мас спектрометрията (МС) се приема за едно от основните средства на персонализираната медицина, чиято същност е индивидуализация на лекарствената терапия – прилагане на най-подходящото лекарство, в най-правилната доза, на подходящо избрания пациент. Генетичното тестване осигурява избор на лекарство, а МС осигурява целия комплекс – актуалния фенотип с оценка на вариациите предизвикани от влияния на патологията, околната среда и лекарствата. Комбинацията газова хроматография – МС първа намира клинично приложение и все още е „работния кон“ на клиничната токсикология. Течната хроматография с тройноквадруполна тандем МС детекция понастоящем е най-използваната платформа, но високо-разделителните МС системи също се пренасят от изследователските в медицинските лаборатории. Големият технологичен напредък на МС позволи разработване и внедряване на методи с изключителна селективност и специфичност, широк линеен обхват, сравнително лесни за работа и основани на дефинитивни аналитични принципи. Нещо повече – възможността за едновременно изследване на всички биологично активни съставки заедно с техните прекурсори и метаболити съществено увеличи информативната стойност на резултатите и качествено подобри диагностиката и терапията. Типични примери са скринингът за вродени грешки на обмяната при новородените деца, управлението на лекарствената терапия и клиничната токсикология, ендокринологията и други области на медицината. Клиничната МС свързва анатомичната и химична патология чрез образните МС методи и йонния хирургически нож, за сега все още експериментално. В заключение, МС открива нови хоризонти в медицината – днес и утре.





**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**SIMPLIFY THE DETERMINATION OF ORGANIC  
POLLUTANTS IN ENVIRONMENTAL SAMPLES.  
UNDERSTANDING THE ADVANTAGES OF MICROWAVE  
EXTRACTION TECHNOLOGY  
FOR ENVIRONMENTAL LABS.**

*Valerio Rindone, Milestone Srl, Via Fatebenefratelli, 1-5, 24010,  
Sorisole, Italy, v.rindone@milestonesrl.com*

Environmental laboratories face numerous challenges to stay competitive in today's market. Increasing productivity while keeping costs down is imperative. Traditional extraction methods such as Soxhlet and sonication, which are time consuming and labor intensive, are still being used for the extraction of water-insoluble or slightly water soluble organic compounds from soils, clays, sediments, sludges and solid waste. With the introduction of EPA method 3546, laboratories can now implement the use of microwave technology for the extraction of semivolatile organic compounds, organophosphorus and organochlorine pesticides, chlorinated and phenoxyacid herbicides, substituted phenols, PCBs and PCDDs/PCDFs from solid matrices. The use of microwave technology results in a fast, safe and more efficient extraction.





**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**UNDERSTANDING THE PROCESS OF MICROWAVE  
ASSISTED DIGESTION FOR METAL & TRACE METAL  
ANALYSIS: THE FIRST STEP TO MAXIMIZE THE  
PERFORMANCES OF YOUR ELEMENTAL ANALYSER.**

*Valerio Rindone, Milestone Srl, Via Fatebenefratelli, 1-5, 24010,  
Sorisole, Italy, v.rindone@milestonesrl.com*

No matters your sample type, your throughput or your analysis instrument: sample preparation for metal determination is a fundamental step to ensure greater analysis quality, higher throughput and lower running costs. Today, digestion is a pivotal step in metals and trace metals analysis, which provides real benefits and a superior workflow for your laboratory. In order to achieve optimum results and the lowest possible detection limit, chemists must consider several factors. The presentation will provide a comprehensive description of all the parameters involved in a digestion step.







**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА НАНОМАТЕРИАЛИ ЧРЕЗ МАССПЕКТРОМЕТРИЯ С ИНДУКТИВНО СВЪРЗАНА ПЛАЗМА – ВЪЗМОЖНОСТИ И ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА**

Д. Георгиева, В. Кметов, К. Симитчиев,  
Е. Върбанова, Л. Кайнарова, В. Стефанова

*ПУ „Паусий Хилендарски“, Катедра аналитична химия и  
компютърна химия, e-mail: georgieva@uni-plovdiv.net*

В резултат на интензивното развитие на нанотехнологиите през последните десетилетия бяха синтезирани многообразни наноразмерни материали с различен състав, свойства и форма на частиците. Широкото им приложение в промишлени продукти, лекарствени вещества и технологични процеси поставя на дневен ред въпроси свързани с антропогенно замърсяване на околната среда и оценка на риска от тяхната употреба. В някои европейски регулации (РЕГЛАМЕНТИ (ЕС) 2016/621 и (ЕС) 2016/1143) вече са въведени норми за пределно съдържание на наноразмерни ZnO и TiO<sub>2</sub> в козметични продукти. В документите на ЕК се посочва, че за адекватна оценка на „нанотоксичността“ на материалите, както и за изработване на съответните норми и стандарти, контролиращи употребата им е необходимо да се положат усилия за създаване и валидиране на надеждни аналитични методи, чрез които да се получи информация, за: i) химични и физични характеристики; ii) разпределение по размери; iii) концентрация на наночастици в обектите; и iv) оценяване на процесите на миграция на йони в разтвор при наноклоидни системи

В лекцията е направен преглед на различни инструментални техники за изследване на наноматериали. Акцент е поставен върху възможностите, които масспектрометрията с индуктивно свързана плазма предоставя за охарактеризиране на наночастици (single particle – SP-ICP-MS). Разгледани са някои специфични проблеми и ограничения на метода при детекция на бързи сигнали, генерирани от единични частици. Посочени са предимствата и предизвикателствата при определяне на състава, размерите и концентрацията на наночастици. Направено е критично сравнение на потенциала на SP-ICP-MS за охарактеризиране на наноматериали, изследване на тяхната токсичност и създаване на надеждни методи за аналитичен контрол с други инструментални техники.

**БЛАГОДАРНОСТИ:** Проект НФНИ INISA № ДН 19/9 2017-2020





 Химически Факултет



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

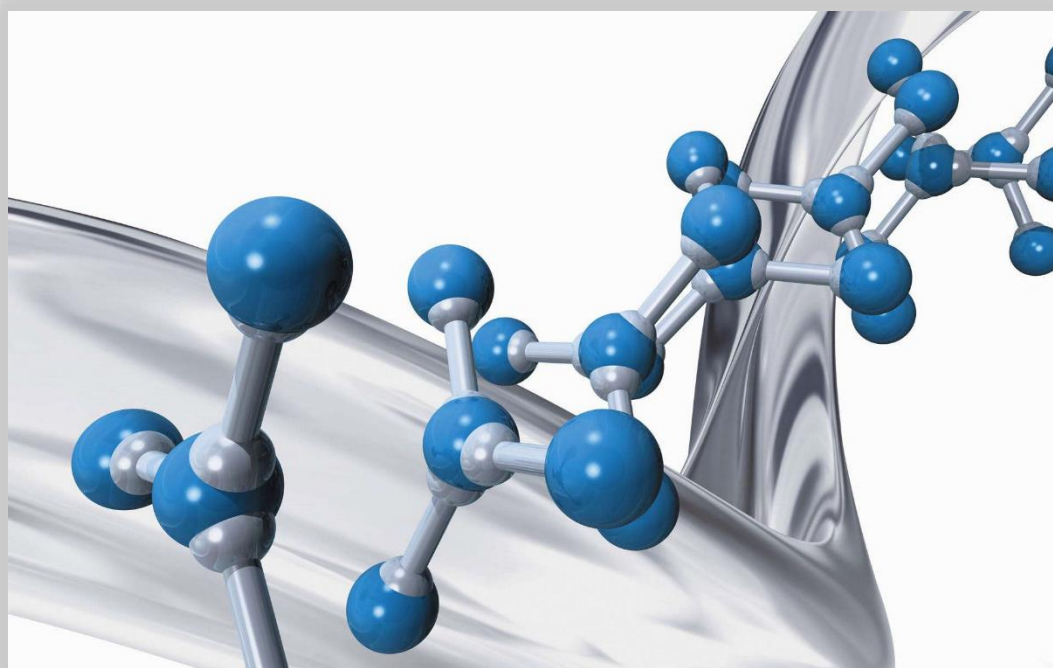


 Химически Факултет



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ - ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **ПОСТЕРИ**





 Химически Факултет



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## ALKALOID PROFILES AND ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORY ACTIVITY OF *CORYDALIS* SPECIES FROM BULGARIA

Ivan G. Ivanov<sup>a\*</sup>, Radka Z. Vrancheva<sup>b</sup>, Ina Y. Aneva<sup>c</sup>, Ivayla N.  
Dincheva<sup>d</sup>, Ilian K. Badjakov<sup>d</sup>, Atanas I. Pavlov<sup>b,e</sup>

<sup>a</sup>*Department of Organic Chemistry and Inorganic Chemistry, University of Food Technologies, Plovdiv, 26 Maritza Blvd., 4002, Plovdiv, Bulgaria;*

<sup>b</sup>*Department of Analytical Chemistry and Physical Chemistry, University of Food Technologies, Plovdiv, 26 Maritza Blvd., 4002, Plovdiv, Bulgaria;*

<sup>c</sup>*Institute of Biodiversity and Ecosystem Research at the Bulgarian Academy of Science, 1113 Sofia, Bulgaria;*

<sup>d</sup>*AgroBioInstitute, Agricultural Academy, 8 Dr. Tsankov Blvd, 1000, Sofia, Bulgaria;*

<sup>e</sup>*Department of Industrial Microbiology, Laboratory of Applied Biotechnologies, The Stephan Angeloff Institute of Microbiology, Bulgarian Academy of Sciences, 139 Ruski Blvd., 4000 Plovdiv*

*\*Corresponding author: e-mail: ivanov\_ivan.1979@yahoo.com;  
Phone/Fax: ++ 359 897 933 791*

The aim of this study was GC-MS analysis of alkaloid profiles of different aerial part (leaves, stems and flowers) from three *Corydalis* species, naturally grown in Bulgaria (*Corydalis solida* (L.) Clairv., *Corydalis marschalliana* (Willd.) Pers., *Corydalis bulbosa* (L.) DC.) and analysis of acetylcholinesterase inhibitory activity of obtained alkaloid extracts, as well. Thirteen isoquinoline alkaloids were identified, with the principal ones being: protoptopines (protopine, allocryptopine and corycavidine); aporphines (corydine, bulbocapnine and nantenine); benzyloisoquinolines (N-methylaurotetanine); protoberberines (styloptopine and canadine); spirobenzyloisoquinolines (parfumine, fumarophycine and bicuculline); and phenanthrenes (thalicthuberine). All of the investigated alkaloid extracts showed significant acetylcholinesterase (AChE) inhibitory activity in comparison with galanthamine (IC<sub>50</sub> 0.31 mg/mL), as the highest activity possesses the leaves extract obtain from *Corydalis solida* and *Corydalis marschalliana* (IC<sub>50</sub> 0.36 mg extract /mL).



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **CATALYTICAL PROPERTIES OF NANOSIZED $MnFe_2O_4$ OBTAINED BY SOLUTION COMBUSTION SYNTHESIS.**

Ts.Lazarova<sup>1</sup>, D.Kovacheva<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>-Institute of General and Inorganic Chemistry, BAS,  
 Acad. G. Bontchev bld.11, 1113, Sofia, Bulgaria, cveti\_ura@abv.bg*

$MnFe_2O_4$  received increasing research interest due to its unique magnetic, electrical, optical and chemical properties.  $MnFe_2O_4$  spinels have unusual optical, electrical, magnetic and electrochemical properties. They can be used as catalysts, as adsorbents for removing heavy metals in water, as ferrofluids, in biomedicine. The solution combustion synthesis is widely used for the preparation of nanosized spinel materials. The type of fuel used in the solution combustion synthesis strongly influences the particle size, morphology and materials properties. In the present study the fuel system (glycine-glycerol) in different ratio (0:1; 0.75:0.25; 0.5:0.5; 0.25:0.75) were used. Structural and morphological characteristics of  $MeFe_2O_4$  (Mn, Co, Ni) spinels were studied by powder X-Ray diffraction (XRD) and Scanning electron microscopy (SEM). Specific surface areas of samples were determined by low-temperature nitrogen adsorption (BET). In order to examine the applicability of the synthesized materials as combustion catalysts, the reaction of complete oxidation of different hydrocarbons (C1-C4 n-alkanes) was investigated.

**KEYWORDS:**  $MnFe_2O_4$ , solution combustion synthesis, catalyst.



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## COMPARATIVE STUDY ON $\text{Cu}^{2+}$ BIOSORPTION ONTO THREE MEDICINAL PLANTS' MATERIALS

Lidia Ivanova\*, Albena Detcheva, Paunka Vassileva

*Institute of General and Inorganic Chemistry,  
 Bulgarian Academy of Sciences  
 Acad. Georgi Bonchev Str., Bl. 11, 1113 Sofia, Bulgaria  
 \*e-mail: [lidia@svr.igic.bas.bg](mailto:lidia@svr.igic.bas.bg)*

In the last decades interest has arisen in the investigation of some unconventional methods and low-cost, easily available and environment friendly biological materials suitable for the efficient removal of heavy metal ions from industrial wastewaters. Biosorption is an alternative technology for water purification using inactive and dead biomass and is attractive due to its simplicity, convenience and high efficiency. Although copper is an essential nutrient to humans, it is toxic at high concentrations. Therefore copper has to be eliminated from contaminated waters before discharging into the environment.

In the present study the use of three medicinal plants – *Mentha spicata* L.(MS), *Ruta graveolens* L.(RG) and *Melissa officinalis* L.(MO) for the removal of  $\text{Cu}^{2+}$  ions from aqueous solution was investigated and compared using the batch method. The plant materials are mesoporous or micro-mesoporous with relatively small specific surface area. The effect of different experimental parameters such as acidity of the medium, contact time and initial metal ion concentration on  $\text{Cu}^{2+}$  removal from aqueous solutions has been evaluated. Three kinetic models – pseudo-first order, pseudo-second order and intraparticle diffusion – were applied and for all plant materials the pseudo-second order model was the best in describing the kinetics. The linear forms of Langmuir, Freundlich and Dubinin-Radushkevich models were fitted to the equilibrium experimental data. It was proved that Freundlich isotherm is most suitable for describing the adsorption process for MS and RG while for MO – the Langmuir isotherm. Maximum adsorption capacities for MS, RG and MO were found to be 46.10, 38.20 and 39.95  $\text{mg g}^{-1}$  respectively, thus indicating that MS shows best sorption properties. Nevertheless the results indicated that all investigated plant materials could be used as effective biosorbents for  $\text{Cu}^{2+}$  removal from waste waters.

**Acknowledgments:** The authors are grateful for the financial support to the Program for supporting young scientists and PhD students from the BAS – 2017 (Project No DFNP-17-35/25.07.2017)





**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**NANOMATERIAL SAFETY DATA INTEGRATION WITH  
SUBSTANCE DATA MODEL AND FEDERATED SEARCH**

N

*<sup>1</sup>Ideaconsult Ltd, Bulgaria, <sup>2</sup>Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry, University of Plovdiv, Bulgaria, <sup>3</sup>Karolinska Institutet, Institute for Environmental Medicine, Sweden, <sup>4</sup>Misvik Biology, Toxicology Division, Finland, <sup>5</sup>Medical and Biological Research Lab., Institute of Molecular Biology – Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria, <sup>6</sup>German Federal Institute for Risk Assessment (BfR), Department of Chemical and Product Safety, Germany*

The basis of most public chemical databases is the direct link between the chemical structure and properties. This paradigm has been used for several decades, providing a platform for virtual screening and modelling of the properties of small molecules. However this approach is too restrictive for many challenging cases, including nanomaterials and industrial chemicals, which may have complex compositions. The REACH definition of a substance encompasses all forms of substances and materials on the market, including nanomaterials. The nanomaterial safety assessment has become an important task following the growth in production of engineered nanomaterials (ENMs) and the increased interest in ENMs from various academic, industry and regulatory parties. Nanomaterials data management is also challenged by the lack of agreed representation of nanomaterials, e.g, the graph theoretic representation of well-defined chemical structures and linear notations such as SMILES and InChI are unsuitable for representing nanomaterials. We present experience with integrating large sets of nanosafety data generated from past NanoSafety Cluster projects with the help of a substance data model, implemented in the eNanoMapper database. This data model is also successfully used to handle chemical substances and safety data from ECHA dossiers. Data generated by multiple nanosafety projects is compiled, annotated and imported into separate eNanoMapper database instances. These databases offer a user friendly web interface and REST API and serve as building blocks to provide federated search across all or subsets of the database instances, enabled by Apache Solr backend. The eNanoMapper ontology is used for harmonisation of the terminology and as a synonym list for query expansion. While multiple structured import formats are supported (IUCLID, RDF, JSON), the nanosafety data from past and ongoing projects use custom spreadsheet templates, currently encompassing over 1000 Excel files. Import of Excel files is enabled by a configurable parser that maps the spreadsheet data via external configuration files. Multiple export formats are supported, including tab delimited files, RDF and ISA-JSON. Free text and faceted search applications, with public and restricted access for different subsets of data, are available at <https://search.data.enanomapper.net>. The NanoReg2 integrated database allows project partners to access data from past EU FP7 funded projects (NANoREG, MARINA, NanoGenotox, Nanotest) through a common view and faceted search. The database is actively used by project partners, helping to identify and, where possible, resolve a range of data quality and completeness issues.

**Acknowledgment:** This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation programme under Grant Agreement No. 646221.

2

V

e

s

s



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**FULL ASSIGNMENT OF  $^1\text{H}$  AND  $^{13}\text{C}$  NMR SPECTRA  
 OF BIS-(1',3'-HYDROXYMETHYL)-SPIRO-(FLUORENE-9,4'-  
 IMIDAZOLIDINE)-2',5'-DIONE**

Maria Frenkeva, Petya Marinova, Marin Marinov<sup>1</sup>, Neyko Soyanov<sup>2</sup>,  
 Plamen Penchev

*Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry,  
 University of Plovdiv, Plovdiv, Bulgaria*

*E-mail: maria.frenkeva@abv.bg*

<sup>1</sup>*Department of General Chemistry, Agricultural University of Plovdiv,  
 Plovdiv, Bulgaria*

<sup>2</sup>*University of Ruse, Razgrad Branch, Razgrad, Bulgaria*

The aim of our work is to fully assign the  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of bis-(1',3'-hydroxymethyl)-spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione. The assignment was assisted by data obtained from  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY, DEPT-135 and HMQC spectrum and confirmed by HMBC spectrum. The  $^1\text{H}$  NMR spectrum of bis-(1',3'-hydroxymethyl)-spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione shows eight peaks – four for the magnetically equivalent aromatic protons in the aromatic rings, as well as two doublets (assigned to the methyl protons) and two triplets (H atoms in the OH groups). Here the  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY spectrum plays an important role in assigning the peaks of the aromatic ring, as well as shows connectivity between protons with signals at  $\delta_{\text{H}}$  6.57 and  $\delta_{\text{H}}$  4.91 on one hand and  $\delta_{\text{H}}$  5.77 and  $\delta_{\text{H}}$  4.40 on the other, which together with the data from the HMBC spectrum is enough to assign all peaks in the  $^1\text{H}$  NMR spectrum. The HMQC spectrum shows direct connectivity of the previously assigned aromatic and methyl protons to their corresponding C atoms. The cross peaks in the HMBC spectrum reveal the assignment of the peaks at  $\delta_{\text{C}}$  141.12 and  $\delta_{\text{C}}$  141.60 ppm to 1a' and 4a' respectively. The assignment of the C=O peaks ( $\delta_{\text{C}}$  155.77 and  $\delta_{\text{C}}$  171.55) is also made with the help HMBC spectrum since only one of them shows cross peak signals with both H-6 and H-7 and therefore belongs to C-2. The experimental data were compared to data obtained with quantum chemistry.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**FULL ASSIGNMENT OF  $^1\text{H}$  AND  $^{13}\text{C}$  NMR SPECTRA  
 OF 4'-BROME- SPIRO-(FLUORENE-9,4'-IMIDAZOLIDINE)-  
 2',5'-DIONE**

Petya Marinova, Maria Frenkeva, Marin Marinov<sup>1</sup>, Neyko Soyanov<sup>2</sup>,  
 Plamen Penchev

*Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry,  
 University of Plovdiv, Plovdiv, Bulgaria  
 E-mail: marinova@uni-plovdiv.bg*

<sup>1</sup>*Department of General Chemistry, Agricultural University of Plovdiv,  
 Plovdiv, Bulgaria*

<sup>2</sup>*University of Ruse, Razgrad Branch, Razgrad, Bulgaria*

The aim of our work is to fully assign the  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of 4'-brome- spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione. The assignment was assisted by data obtained from  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY, DEPT-135 and HMQC spectrum and confirmed by HMBC spectrum.

The  $^1\text{H}$  NMR spectrum of 4'-brome- spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione shows nine peaks – seven for the aromatic rings and two singlets that belong to the protons at the N atoms. They can easily be assigned since one of them ( $\delta=8.61$ ) shows cross peaks in the HMBC spectrum that identifies it as H-1. The assignment of the rest heavily relies on the  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY and HMBC spectral data. Particularly the cross peaks in the  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY spectrum that reveal the assignment of peaks in both aromatic rings. This assignment is confirmed by the HMQC spectrum. The  $^{13}\text{C}$  NMR spectrum of 4'-brome- spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione shows 14 peaks with two of them being very closely situated to one another ( $\delta=121.24$  and  $121.27$ ). Only one of them appears in the DEPT-135 which reveals  $\delta=121.27$  to be connected to Br. At this point the assignment of the peaks in the  $^{13}\text{C}$  NMR spectrum relies on the relations shown in the HMBC spectrum. The assignment of the C=O peaks is made by comparison with bis-(1',3'-hydroxymethyl)-spiro-(fluorene-9,4'-imidazolidine)-2',5'-dione since there are not any substitutes which cross peaks could appear in the HMBC spectrum. The experimental data were compared to data obtained with quantum chemistry.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **ОЦЕНКА НА ТЕРАПЕВТИЧНОТО ДЕЙСТВИЕ НА ГЛИЦЕРИДНО МАСЛО ОТ СЕМЕНА НА КИНОА НА БАЗА ЛИПИДНИ ИНДЕКСИ**

Жана Петкова, Жанет Симеонова, Сибел Мустафа,  
Илинка Тодорова

*Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“, Катедра Химична  
технология, ул. „Цар Асен“ 24, 4000 Пловдив, България,  
e-mail: zhanapetkova@uni-plovdiv.net*

Изследван е мастнокиселинният състав на масло от семена на два сорта киноа (бяла и микс) от вида *Chenopodium quinoa* Willd. чрез газова хроматография. Определени са основни мастнокиселинни съотношения (полиненаситени: наситени мастни киселини) и важни за здравословното хранене липидни индекси (атерогенен, тромбогенен и холестеролемичен). Преобладаващите мастни киселини в триацилглицероловата фракция са линоловата (47,5%) и олеиновата (28,5 – 33,2%), последвани от палмитиновата киселина (14,6 – 15,6%). Съотношението между полиненаситени и наситени мастни киселини в изследваните масла (съответно 3,28 и 2,89) е с по-високи стойности в сравнение с препоръчителните норми (от 0,8 до 1,2), което се дължи на значително по-голямото съдържание на полиненаситени мастни киселини (53,1 и 49,4%). Стойностите на атерогенния и тромбогенния индекс са сравнително ниски под единица (съответно 0,19 – 0,20 и 0,28 – 0,36), а на холестеролемичния индекс (5,40 и 5,23) е в препоръчителните норми (над 1,0). Наблюдаваната тенденция холестеролемичен индекс > тромбогенен индекс > атерогенен индекс е показател за анти-атерогенни, анти-тромбогенни свойства и по-добър хипохолестеролемичен потенциал на маслото от семена на киноа.

**Благодарности.** Изследванията са проведени с финансовата подкрепа на договор ФП17-ХФ-013, фонд „Научни изследвания“ при поделение „Научна и проектна дейност“ на ПУ „Паисий Хилендарски“.



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## COMPARISON OF VIBRATIONAL AND UV-VIS SPECTRA OF [3,3':3',3''-TERINDOLIN]-2'-ONE

S. Manolov<sup>1</sup>, S. Tsoneva<sup>2</sup>, I. Ivanov\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>University of Plovdiv „Paisii Hilendarski“,  
 Department of Organic Chemistry

<sup>2</sup> University of Plovdiv „Paisii Hilendarski“,  
 Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry  
 ivanov@uni-plovdiv.bg

Isatin is a heterocyclic natural product which is found in plants of the genus *Isatis*. Compounds with indole moieties exhibit antibacterial and antifungal activities. The importance of 3,3'-disubstituted oxindoles lies in their employment as drug candidates. In particular, [3,3':3',3''-terindolin]-2'-one is frequently found in clinical drugs and biologically active compounds and possesses anti-proliferative, antibacterial, anti-protozoal and anti-inflammatory activities. A green and eco-friendly method for synthesis of [3,3':3',3''-terindolin]-2'-one was applied for its synthesis. The procedure we report using the system TfOH/SiO<sub>2</sub> offers easy, quick, economical and eco-friendly synthesis of the desired product with high yield for short time without any waste products. We have measured and compared the IR, Raman and ATR spectra of the obtained compound. A UV-Vis spectrum shows that A<sub>max</sub> is in 221nm.

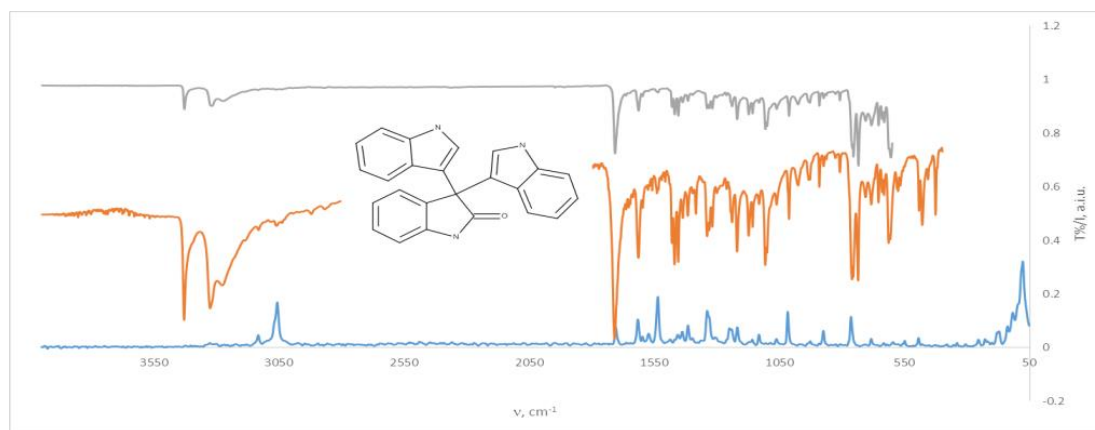


Fig.1 IR, Raman and ATR spectrum of [3,3':3',3''-terindolin]-2'-one.

We acknowledge financial support from the fund for scientific research of the Plovdiv University – ФП 17 ХФ 013.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**COMPARATIVE STUDY OF INTERNAL STANDARD  
 EFFICIENCY IN ICP-MS ELEMENTAL ANALYSIS  
 IN HUMAN SERUM**

D. Davcheva<sup>1,2</sup>, G. Kirova<sup>2,3</sup>, D. Tsvetkova<sup>2</sup>, V. Kmetov<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Medical University of Plovdiv, Department of Clinical Laboratory

<sup>2</sup>Technological Center for Emergency Medicine Plovdiv

<sup>3</sup>Medical University of Plovdiv, Department of Chemical Sciences

<sup>4</sup>University of Plovdiv „Paisii Hilendarski“,

Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry

d.davcheva@hotmail.com

Inductively coupled plasma-mass spectrometry (ICP-MS) is powerful technique for trace multielement and isotopic analysis, characterized by low limits of detection, wide linear range and high sample throughput. This makes the method attractive for simultaneous determination of macro-, trace- and ultratrace elements in human serum. However the instrumental method is sensitive to matrix type, therefore it requires introduction of diluted sample solutions. A microwave digestion with HNO<sub>3</sub> helps for alignment of the matrix diversity of serum samples, but still nonspectral interferences are noticed as matrix-induced signal suppression or enhancement, as well as signal instability or drift. In order to achieve accurate and reliable results an Internal standard (IS) approach could be effective in such cases, if the interference effects over the signals of the analyte and IS are matched.

The purpose of the current study was to examine the behaviour of three isotopes – <sup>103</sup>Rh, <sup>185</sup>Re and <sup>89</sup>Y as IS candidates for multielement analysis in human serum samples by ICP-MS (Thermo Fisher Scientific, iCAPQ). Their efficiency for matrix effects correction was estimated regarding to the signals of <sup>24</sup>Mg, <sup>44</sup>Ca, <sup>31</sup>P, <sup>55</sup>Mn, <sup>56</sup>Fe, <sup>59</sup>Co, <sup>65</sup>Cu, <sup>66</sup>Zn, <sup>78</sup>Se, <sup>85</sup>Rb, <sup>88</sup>Sr, <sup>95</sup>Mo and <sup>137</sup>Ba.

An on-line internal standard kit (Thermo Fisher Scientific, iCAPQ) was used for IS introduction to the calibrators and the serum samples with constant flow rate at 0.25 mL min<sup>-1</sup> and sample flow rate of 0.41 mL min<sup>-1</sup>.

During the experiment an upward drift in the instrument sensitivity has been observed. The drift in the intensities of the studied elements was up to 20%, for 1 h of analysis run time in KED mode.

The variation of the intensities of the analyzed elements was compared to those of the reference elements, to select appropriate IS, with absolute difference of ± 5%. The observed experimental results showed, that the most suitable IS for all of the elements was <sup>89</sup>Y, with exception of <sup>95</sup>Mo, where <sup>185</sup>Re appeared out to be the IS of choice.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **EXTRACTION OF RHENIUM FROM BASALT PUMICE FROM VOLCANO TEIDE, TENERIFE ISLAND**

Christina Tzvetkova<sup>\*1</sup> and Tsvetan Vassilev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of General and Inorganic Chemistry,  
 Bulgarian Academy of Sciences,*

<sup>2</sup>*Institute of Physical Chemistry „Acad. Rostislav Kaishcew“,  
 Bulgarian Academy of Sciences*

*Acad. Georgi Bonchev Str., Bl. 11, 1113 Sofia, Bulgaria*

*\*e-mail: hrisi@svr.igic.bas.bg*

Rhenium is one of the rarest elements in the Earth's crust (0.7 ng/g). Since it is one of the most expensive metals on the world market, the search for new rhenium sources continues. In 1992 Russian scientists discovered a rhenium sulphide mineral condensing from a fumarole on Kudriavy volcano. This makes the volcanic pumice a potential economic source for rhenium production.

The aim of the present study is to develop the effective analytical procedures for extraction of rhenium from basalt pumice from volcano Teide, Tenerife Island. The basalt pumice is an extrusive volcanic rock, produced when lava with a very high content of water and gases is discharged from a volcano. It is rich in Fe and Mg and usually contains the minerals olivine, pyroxene and plagioclase. For decomposition of the volcanic samples three procedures are tested, namely:

- a) Alkaline melting with anhydrous  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  at 925°C for 1 hour in nickel crucible;
- b) Alkaline melting with mixture of  $\text{Na}_2\text{O}_2$  and  $\text{Na}_2\text{O}_3$  at 530°C for hour and a half in nickel crucible.

In both cases, the melt is cooled and leached with hot water. Rhenium is separated from resulting solution by acetone extraction.

- c) Vacuum thermal-extraction of rhenium in quartz apparatus at 920°C for 1 hour. The heated gases containing rhenium oxide are absorbed by an alkali solution in a Drechsel bottle.

The rhenium content in acetone extracts and in alkali solution is determined spectrophotometrically with dimethyldithiooxamide (DMDTO).

The results show that 100% Re extraction is obtained by applying of the procedure a – 6.9 g Re/t. In procedures b and c, 19% and 11% respectively are obtained.



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **СПЕКТРАЛНИ МЕТОДИ ЗА ИЗСЛЕДВАНЕ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА Ag И Au НАНОЧАСТИЦИ – ВЪЗМОЖНОСТИ И ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА**

Л. Кайнарова, Д. Георгиева, Е. Върбанова,  
А. Иванчева, М. Иванова, В. Стефанова

*ПУ“Паусий Хилендарски“, гр. Пловдив, ул. Цар Асен 24  
Катедра Аналитична химия и Компютърна химия  
e-mail: lykainarova@gmail.com*

Навлизането на нанотехнологиите и наноматериалите в различните сфери на човешката дейност започва още в края на миналия век, като в последните няколко години те намират все по-широко приложение в медицината, биотехнологиите, електротехниката и други индустриални дейности. Голяма част от изследванията са насочени към сребърните и златни наночастици, основно заради техните анти-бактериални свойства.

В настоящата разработка направените изследвания са насочени в два аспекта: 1) избор на подходящи методи за синтез; 2) оптимизиране на режими за въвеждане и регистрация анализ на сигнали, генерирани от единични наночастици.

Избраните методи за синтез се основават на химична редукция на  $Ag^+/Au^+$  до  $Ag^0/Au^0$  и последваща стабилизация на редуцираните форми. При синтеза на Ag-наночастици като редуциращ и стабилизиращ агент се използват  $NaBH_4$  и  $Na_3C_6H_5O_7$ . Au-наночастици са синтезирани по метода на Тюркевич, при който  $Na_3C_6H_5O_7$  изпълнява функция на редуциращ и на стабилизиращ агент. И двата подхода са бързи и лесни за изпълнение, и благоприятни за околната среда.

За изследване на наночастиците са използвани два спектрални метода – UV-vis и SP-ICP-MS. UV-vis е класически метод, който позволява определяне на средния размер на частиците и стабилността Au- и Ag-наноколоиди. За разлика от него SP-ICP-MS е сравнително нов и много мощен метод, основан на детекцията на единична наночастица, използвайки ICP-MS детектор. Методът работи при много ниски концентрации ( $pg L^{-1}$ ) и позволява пълно охарактеризиране по размери на наночастици за кратък период от време (~500 наночастици за 60 s). Предизвикателствата пред SP-ICP-MS са свързани със стабилизиране на въвежданите наноколоиди, пределното разреждане, осигуряващо разделяне на сигналите от индивидуални частици и регистрирането на бързите пикови сигнали.

**БЛАГОДАРНОСТИ:** Проект НФНИ INISA № ДН 19/9 2017-2020





ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## DETERMINATION OF SILVER IN NATURAL WATER BY MSPE WITH $\text{MnFe}_2\text{O}_4@\text{SiO}_2$ AND ICP-MS DETECTION

Evelina Varbanova, Maya Ivanova, Deyana Georgieva,  
Violeta Stefanova

*University of Plovdiv „P. Hilendarski“, Plovdiv, 24 Tzar Asen str.  
e-mail: evarbanova@uni-plovdiv.net*

The study demonstrates the applicability of magnetic solid phase extraction (MSPE) with  $\text{MnFe}_2\text{O}_4@\text{SiO}_2$  for selective determination of silver ions in waters. Main extraction parameters are optimized in order to achieve highest efficiency of the separation system. The extraction time ranges from 5 to 60 minutes. The results show that 5 minutes are sufficient to retain  $\text{Ag}^+$ . It was established that 20 mg of nanoparticles are enough to provide a quantitative extraction of silver from 100 mL sample with concentration  $1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ . Re-extraction of the analyte is done by  $1 \text{ mol L}^{-1}$  nitric acid and shaking the samples for 15 minutes. The maximum concentration factor that is obtained with sample volume of 100 mL is  $\text{CF}=50$ . Reproducibility of the extraction is demonstrated with 6 calibration standards containing  $\text{Ag}^+$  in the interval  $2\text{--}100 \text{ ng L}^{-1}$  which were subjected to the optimized SPE procedure. Obtained coefficient of determination of the regression line is 0.9992. All measurements are done by ICP-MS and internal standardization with  $^{103}\text{Rh}$ . Limit of detection obtained by concentration factor 50 is  $0.06 \text{ ng L}^{-1}$  for  $^{107}\text{Ag}$ .

The developed extraction system is applied for determination of silver in real sample drinking water. Accuracy of the method was assessed by analysis of two reference materials and the recoveries of standard additions to the real sample. The analytical recovery of additions and reference materials are in the interval 95-108%.

**Acknowledgements:** Project ФП17-ХФ-013-НПД-ПУ, NSF Project DN19/9 2017-2020 (INISA).



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## METOD DEVELOPMENT FOR TRACE DETERMINATION OF As BY MSIS-HG-MP-AES

*M. Kiryakova, D. Stoitsov, E. Varbanova, K. Simitchiev, V. Kmetov,  
Dep. of Analytical Chemistry and Computer Chemistry,  
University of Plovdiv „Paisii Hilendarski“, 24 Tzar Assen Str.,  
Plovdiv 4000, Bulgaria*

*E-mail: kiryakova@uni-plovdiv.net*

An effective technique for generation of hydrides of elements such as As, Se, Sb ect. by using a new commercial Multi Mode Sample Introduction System (MSIS)<sup>®</sup> combined with nitrogen microwave plasma atomic emission spectrometry (MP-AES) enables to lower the limits of detection (LODs) for the target elements in comparison to conventional nebulisation. The aim of this study was to enhance the performance characteristics of the MSIS system for trace determination of As by MP-AES. The ratio of the flow rates of the sample and NaBH<sub>4</sub> was evaluated in this hydride generation based approach. The capability of working with maximum flow rates possible with the aim to increase the analyte mass transfer in the plasma and to achieve better signal to noise ratio was studied. Steady reagents flows, fast gas-liquid separation and efficient draining of the MSIS system are essential conditions for achieving good precision. To obtain a uniform liquid flow a modification of the sample entry section of the MSIS chamber was done – the original entrance diameter was expanded to 1.2 mm. This modification helps to increase the total liquid flow to 21 ml/min, to eliminate the backpressure and to achieve a steady flow. A central composite design was applied for characterization of the complex influence of the most significant MSIS parameters – carrier gas flow rate, sample and NaBH<sub>4</sub> flow rates and to identify the optimal value for lowering the LOD for As determination at 193.695 nm emission line. A simple and inexpensive method for analysis of very low concentration of As with instrumental LOD < 1 µg/L was developed.

**Acknowledgments:** The authors would like to thank T.E.A.M.Ltd. and Agilent technologies for kindly providing Agilent 4200 MP-AES instrumentation to the Department of Analytical chemistry and Computer chemistry in University of Plovdiv „P. Hilendarski“, NSF Project DN19/9 2017-2020 (INISA) and Project FP17-CF-013-NPD



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

## **ОЦЕНКА НА ПОДХОД ЗА ОП-РЕАК ФОНОВА КОРЕКЦИЯ ПРИ МР-АЕС АНАЛИЗ НА Cd, Cr, Cu, Ni, Pb И Zn В СТАБИЛИЗИРАНА ОРГАНИЧНА ФРАКЦИЯ ОТ БИТОВИ ОТПАДЪЦИ**

*В. Запрянова<sup>1,2,\*</sup>, Е. Пискова<sup>2</sup>, К. Сумитчиев<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>ПУ „Паусий Хилендарски“, Катедра аналитична химия  
и компютърна химия, \*e-mail: vzaryanova@uni-plovdiv.net  
<sup>2</sup>Енергийна агенция Пловдив, Лаборатория за изпитване на  
твърди биогорива и компост*

Атомно-емисионната спектрометрия с микровълнова плазма (MP-AES) е инструментална техника, позволяваща провеждането на елементен анализ при ниски експлоатационни разходи. Използваната микровълнова плазма като източник за получаване на спектрално активна форма на веществото, обаче, е със съществено по-ниска температура от алтернативно прилаганата в емисионната спектроскопия индуктивно свързана плазма. Относително по-ниската работна температура на МР е предпоставка за по-силно изразени матрични ефекти, възникващи в плазмения източник.

Целта на настоящето изследване бе да се проучи възможността за оп-реак фонова корекция при анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в проба получена от процеса на механично-биологично третиране на остатъчната твърда фракция от потока битови отпадъци, която е биологично стабилизирана („стабилизирана органична фракция“). В хода на изследването бе наблюдавано понижение (Cd 228.802 nm; Cu 327.395 nm; Ni 349.295 nm; Zn 213.857 nm) или повишение (Cr 427.480 nm; Pb 405.781 nm) на плазмения фон в разтворите на пробите, спрямо базовата линия на процедурната празна проба. Следователно успешната реализация на подхода за оп-реак фонова корекция изисква предварително да се установи величината на изменение на плазмения фон при работната дължина на вълната. Установено бе, че фоновото изменение за съседни (off-line) точки на наблюдение (спектрален прозорец  $\pm 0.5$  nm) не е постоянно, поради което са проучени възможностите за регистриране на фоновия сигнал при линията на анализа чрез анализ на моделен разтвор с имитирана пробна матрица и алтернативна off-реак фонова корекция.

**БЛАГОДАРНОСТИ:** Фирма TEAM за предоставения демонстрационен спектрометър на Agilent 4200 MP-AES в Химически Факултет на ПУ „П. Хилендарски“; ФНИ Проект ДН19/9 2017-2020 (INISA); Проект ФП17-ХФ-013-НПД-ПУ; Авторите изказват благодарност на доц. д-р Виолета Стефанова за проведените дискусии и направените предложения.



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## INVESTIGATION OF POSSIBILITIES FOR SOLID PHASE EXTRACTION OF Cr (III) AND Cr (VI) ON UNMODIFIED MANGANESE-FERRITE NANOPARTICLES - INFLUENCE OF pH

Andrea Rubio<sup>1</sup>, Devid Heshev<sup>2</sup>, Deyana Georgieva<sup>2</sup>

<sup>1</sup> University of Alicante, Spain; <sup>2</sup> University of Plovdiv "Paisii Hilendarski",  
Department of Analytical Chemistry and Computer Chemistry

e-mail: georgieva@uni-plovdiv.net

The possibilities for selective sorption of chromium species (i.e. Cr (III) and Cr (IV)) on unmodified manganese-ferrite ( $\text{MnFe}_2\text{O}_4$ ) nanoparticles (MNPs) were studied. Without presence of ligand, the sorption mechanism of Chromium ions on MNPs surface could be based on electrostatic attraction.

The theoretical equilibria evaluation, shows that charge of both chromium species depends on solution pH. In acidic media (pH 2-3), Cr (IV) is presented as oxo-anion, while Cr (III) is in cationic form. At higher pH values (above 9), both forms are negatively charged due to Cr(III) hydroxo-complexes formation.

The nanoparticles surface also is positively or negatively charged depending on the acidity of the liquid phase.

The surface charge of  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  NPs was estimated by pH drift method. It was proven that MNPs used in this study have zero charge at  $\text{pH} = 6 \pm 0.5$ . Below this value they are positively charged, while at  $\text{pH} > 6$  MNPs have negatively charged surface.

The influence of pH of solution on Cr species sorption was investigated in pH range 3-10 separately, by using model solutions of  $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ ;  $\text{K}_2\text{CrO}_4$  and  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ .

The sorption efficiency was evaluated by degree of extraction E%, after ICP-MS determination of residual concentration of Cr in water phase after extraction. For Cr (VI) degree of extraction ( $E\% > 95\%$ ) was obtained at  $\text{pH} = 3$  for both  $\text{CrO}_4^{2-}$  and  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ . Then increasing pH leads to gradual decrease of extraction to 18% at  $\text{pH} = 10$ .

A different behavior was achieved for Cr (III), where the extraction in acidic media is low. In the range  $\text{pH} 5 - 9$   $E > 90\%$  was determined and then in strongly basic media extraction is worsening again.

The obtained specific behavior of chromium shows the potential of ligandless MSPE for speciation of Cr. The method is fast, easy to perform and further investigations are needed to validate the system.

**Acknowledgements:** Project DN19/9 2017-2020 (INISA).



ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ

## ОЦЕНКА НА ВЛИЯНИЕТО НА КИСЕЛИННАТА СМЕС И НАЧИНА НА ВЪВЕЖДАНЕ НА ЕНЕРГИЯ В СИСТЕМАТА ВЪРХУ ЕФЕКТИВНОСТТА НА ИЗВЛИЧАНЕ НА МИКРОЕЛЕМЕНТИ (As, Sb, In) ОТ ТЕХНОЛОГИЧНИ ПРОБИ В МЕТАЛУРГИЧНОТО ПРОИЗВОДСТВО НА ЦИНК

Н. Сотирова<sup>1</sup>, Д. Георгиева<sup>2</sup>, В. Стефанова<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> КЦМ АД, Химическа лаборатория

<sup>2</sup> Пловдивски университет „П. Хилендарски“, Катедра Аналитична химия и компютърна химия; \* e-mail: stefanova@uni-plovdiv.net

Надеждното извличане на микроелементите As, Sb и In в сложни по състав матрици изисква подходяща методика за разтваряне на пробите. Избрани са четири материала от металургичното производство на цинк. Изследвани са два основни подхода за разтваряне: класическо разлагане в киселинна смес на термична плоча и микровълново разтваряне в затворени съдове (МВ). При еднакви условия са изследвани две киселинни смеси („царска вода“ и „смес на Лунге“), както и добавяне на HF за атакуване на силикати от матрицата.

За оценка на риска от загуба на летливи съединения на As и Sb, към паралелни проби предварително са добавени стандартни разтвори в концентрации, съизмерими със съдържанието им в реалните обекти. Изследван е и неспектралният матричен ефект при ICP-OES анализ върху сигналите на елементите As, Sb, In, предизвикан от използваната киселинна смес и начина на третиране. Наблюдавани са по две от най-чувствителните линии за всеки елемент. Проследена е промяната в наклоните на калибрационните линии във водни стандарти и в празните проби за всяко разтваряне. Факторите на разреждане са варираны в интервала 100, 500 и 10 000.

Изследванията показват, че няма разлика в извличането на анализите при конвенционално и МВ, както и от избора на киселинна смес.

Установи се вариация в матричния ефект в зависимост от процедурата и киселинната смес. Третирането в отворени съдове намалява остатъчното съдържание на киселини и влиянието им върху аналитичните сигнали. МВ разтваряне е по-бързо и изисква значително по-малко киселини, но се препоръчва допълнително разреждане на пробите (поне до фактор 500).

**БЛАГОДАРНОСТИ:** Проект ФП17-ХФ-013-НПД-ПУ



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

**СЪДЪРЖАНИЕ**

|   |    |
|---|----|
| TARGETED AND NON-TARGETED SCREENING SOLUTIONS FOR RESIDUES IN ENVIRONMENT AND FOOD .....  | 6  |
| HYPHENATED MULTI-RESIDUE ANALYSIS METHODS USING TRIPLE-QUADRUPOLE MASS SPECTROMETRY .....   | 8  |
| КЛИНИЧНАТА МАС СПЕКТРОМЕТРИЯ КАТО ПЛАТФОРМА НА ПЕРСОНАЛИЗИРАНАТА МЕДИЦИНА .....   | 10 |
| SIMPLIFY THE DETERMINATION OF ORGANIC POLLUTANTS IN ENVIRONMENTAL SAMPLES. UNDERSTANDING THE ADVANTAGES OF MICROWAVE EXTRACTION TECHNOLOGY FOR ENVIRONMENTAL LABS.....  | 12 |
| UNDERSTANDING THE PROCESS OF MICROWAVE ASSISTED DIGESTION FOR METAL & TRACE METAL ANALYSIS: THE FIRST STEP TO MAXIMIZE THE PERFORMANCES OF YOUR ELEMENTAL ANALYSER..... | 14 |
| ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ НА НАНОМАТЕРИАЛИ ЧРЕЗ МАССПЕКТРОМЕТРИЯ С ИНДУКТИВНО СВЪРЗАНА ПЛАЗМА – ВЪЗМОЖНОСТИ И ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА .....  | 16 |
| ALKALOID PROFILES AND ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORY ACTIVITY OF <i>CORYDALIS</i> SPECIES FROM BULGARIA.....   | 21 |
| CATALYTICAL PROPERTIES OF NANOSIZED MnFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub> OBTAINED BY SOLUTION COMBUSTION SYNTHESIS.....   | 22 |
| COMPARATIVE STUDY ON Cu <sup>2+</sup> BIOSORPTION ONTO THREE MEDICINAL PLANTS' MATERIALS .....  | 23 |
| NANOMATERIAL SAFETY DATA INTEGRATION WITH SUBSTANCE DATA MODEL AND FEDERATED SEARCH .....   | 24 |
| FULL ASSIGNMENT OF <sup>1</sup> H AND <sup>13</sup> C NMR SPECTRA OF BIS-(1',3'-HYDROXYMETHYL)-SPIRO-(FLUORENE-9,4'-IMIDAZOLIDINE)-2',5'-DIONE .....                    | 25 |
| FULL ASSIGNMENT OF <sup>1</sup> H AND <sup>13</sup> C NMR SPECTRA OF 4'-BROME- SPIRO-(FLUORENE-9,4'-IMIDAZOLIDINE)-2',5'-DIONE .....                                    | 26 |



**ОКОЛНА СРЕДА, МЕДИЦИНА, НАНОМАТЕРИАЛИ – ИНОВАТИВНИ  
 МЕТОДИ ЗА ПРОБОПОДГОТОВКА И АНАЛИЗ  
 29 Май 2018, ПЛОВДИВ**

|   |    |
|---|----|
| ОЦЕНКА НА ТЕРАПЕВТИЧНОТО ДЕЙСТВИЕ НА ГЛИЦЕРИДНО МАСЛО<br>ОТ СЕМЕНА НА КИНОА НА БАЗА ЛИПИДНИ ИНДЕКСИ .....   | 27 |
| COMPARISON OF VIBRATIONAL AND UV-VIS SPECTRA OF [3,3':3',3"-<br>TERINDOLIN]-2'-ONE.....   | 28 |
| COMPARATIVE STUDY OF INTERNAL STANDARD EFFICIENCY IN ICP-MS<br>ELEMENTAL ANALYSIS IN HUMAN SERUM .....  | 29 |
| EXTRACTION OF RHENIUM FROM BASALT PUMICE FROM VOLCANO<br>TEIDE, TENERIFE ISLAND .....   | 30 |
| СПЕКТРАЛНИ МЕТОДИ ЗА ИЗСЛЕДВАНЕ И ОХАРАКТЕРИЗИРАНЕ<br>НА Ag И Au НАНОЧАСТИЦИ – ВЪЗМОЖНОСТИ И ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА.....   | 31 |
| DETERMINATION OF SILVER IN NATURAL WATER BY MSPE WITH<br>$MnFe_2O_4@SiO_2$ AND ICP-MS DETECTION .....   | 32 |
| METHOD DEVELOPMENT FOR TRACE DETERMINATION<br>OF As BY MSIS-HG-MP-AES .....   | 33 |
| ОЦЕНКА НА ПОДХОД ЗА ON-PEAK ФОНОВА КОРЕКЦИЯ ПРИ MP-AES<br>АНАЛИЗ НА Cd, Cr, Cu, Ni, Pb И Zn В СТАБИЛИЗИРАНА ОРГАНИЧНА<br>ФРАКЦИЯ ОТ БИТОВИ ОТПАДЪЦИ.....  | 34 |
| INVESTIGATION OF POSSIBILITIES FOR SOLID PHASE EXTRACTION<br>OF Cr (III) AND Cr (VI) ON UNMODIFIED MANGANESE-FERRITE<br>NANOPARTICLES – INFLUENCE OF pH .....   | 35 |
| ОЦЕНКА НА ВЛИЯНИЕТО НА КИСЕЛИННАТА СМЕС И НАЧИНА НА<br>ВЪВЕЖДАНЕ НА ЕНЕРГИЯ В СИСТЕМАТА ВЪРХУ ЕФЕКТИВНОСТТА<br>НА ИЗВЛИЧАНЕ НА МИКРОЕЛЕМЕНТИ (As, Sb, In) ОТ ТЕХНОЛОГИЧНИ<br>ПРОБИ В МЕТАЛУРГИЧНОТО ПРОИЗВОДСТВО НА ЦИНК..... | 36 |

**thermo**  
scientific

Authorized Distributor

**ERWEKA**

**ELGA**  **VEOLIA**

**PEAK**   
SCIENTIFIC

**LabTech**

 **MILESTONE**  
HELPING  
CHEMISTS



**ACM2**

[www.acm2.com](http://www.acm2.com)  
e-mail: [office@acm2.com](mailto:office@acm2.com)



## ПРЕДЛАГА

### Бакалавърски програми:

- Химия
- Компютърна химия
- Медицинска химия
- Химия с маркетинг
- Анализ и контрол
- Химия и физика
- Химия и английски език

### Магистърски програми:

- Медицинска химия
- Хранителна химия
- Химия и екология
- Спектрохимичен анализ
- Компютърна химия
- Учител по химия

### Курсове за квалификация:

- Високоэффективна течна хроматография

### Краткосрочни квалификационни курсове за специалисти:

- Базова статистика и метрология в химичния анализ
- Неопределеност при химични изпитвания и изготвяне бюджет на неопределеността на резултати от химични анализи
- Вътрешно-лабораторно валидиране на процедурата на изпитване при химични анализи
- Пламъков атомно-абсорбционен спектрален анализ (FAAS), аналитични характеристики и приложения
- Електротермичен атомно-абсорбционен спектрален анализ (ETAAS), аналитични характеристики и приложения
- Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма (ICP-OES), аналитични характеристики и приложения
- Приложение на масспектрометричния анализ с индуктивно свързана плазма (ICP-MS)





 Химически Факултет

**АСМ2** *повече от* **20** *години*

**thermo**  
scientific

---

Authorized Distributor

---



**MILESTONE**  
H E L P I N G  
C H E M I S T S

Материалите са отпечатани с финансовата подкрепа  
на фонд „Научни изследвания“ при Пловдивския университет,  
договор № ЧФ18-ХФ-002