

**CONTENTS**

<i>S. Z. Zlatkova, Z. K. Smedarchina</i> , Theoretical Study of Tunneling in Proton Transfer Laser Dyes: The 2-(2'-Hydroxyphenil) benz-imidazole as a Test Case .....	7
<i>P. Ivanov, T. Momchilova, Z. Slanina</i> , Molecular Mechanics and Semiempirical Molecular Orbital Study of the Conformation of Esters of 2,3-Substituted 3-Benzoylaminopropanoic Acid ..	19
<i>S. I. Karakashev, E. D. Manev, G. I. Karakashev</i> , Description of the Adsorption Behaviour of Surfactant Species on Air/Water Interface .....	32
<i>J. Cvetkovic, S. Arpadjan, I. Karadzova, T. Stafilov</i> , Determination of Selenium in Wine by Electrothermal Atomic Absorption Spectroscopy .....	50
<i>I. T. Devedjiev, E. A. Hassan, V. G. Ganey</i> , Synthesis and Biological Activity of Hydrophosphoryls Aminoglycoside Antibiotics ...	58
<i>U. J. Jáuregui-Haza, R. Nikolova, A.-M. Wilhelm, H. Delmas, I. Nikov</i> , Selective Hydroformylation of Monoterpenes using Supported Aqueous Phase Catalysis (SAPC).....	64
<i>Cs. Sisak, T. Venyige</i> , Studies on the Application of Integrated Bio-reactors to Convert Saccharides.....	76
<i>T. S. Petrova, K. A. Semkov, P. Moravec</i> , Determination of the Characteristic Packing Size in the Mathematical Model for Liquid Phase Spreading in Packed-Bed Columns with Deflecting Rings.....	82

## СЪДЪРЖАНИЕ

<i>С. З. Златкова, З. К. Смедарчина</i> , Теоретично изследване на процеса на тунелиране при лазерните багрила с прото-нен пренос: случай на 2-(2'-хидроксифенил)бензимидазол .....	18
<i>П. М. Иванов, Т. Г. Момчилова, З. Сланина</i> , Изследване на конформациите на естери на 2,3-дизаместени- 3-бензоил-аминопропионови киселини с молекулна механика и полумпирични квантовохимични методи .....	31
<i>Ст. Ив. Каракашев, Е. Д. Манев, Г. Ив. Каракашев</i> , Описание на адсорбционното поведение на повърхностно-активни вещества на гранична повърхност вода/въздух.....	49
<i>Ю. Д. Цветкович, С. Х. Арпаджян, И. Б. Караджова, Т. З. Стафилов</i> , <i>Определяне на селен във вино чрез електро-химична атомно-абсорбционна спектрометрия.....</i>	57
<i>Ив. Т. Деведжиев, Ер. А. Хасан, В. Г. Ганев</i> , Синтез и биологична активност на хидрофосфорилни аминокликозидни анти-биотици .....	63
<i>У. Х. Аза, Р. Николова, А.-М. Вилхем, Х. Делмас Й. Ников</i> , Селективно хидроформалиране на монотерпени при използване на воднофазна катализ (SAPC).....	75
<i>Ч. Шишак, Т. Вениге</i> , Изследвания върху използването на интегрирани биореактори за извличането на захариди ....	81
<i>Т. Петрова, К. Семков, П. Моравец</i> , Определяне на характерния размер на пълнежа в математичния модел, описващ процес на разтичане на течност в колони с пълнеж и отражателни пръстени.....	98

## CONTENTS

<i>E. P. Slavcheva, S. Ernst, H. Baltruschat</i> , Sensitivity of a Dynamic Electrochemical Sensor towards Toluene in the Presence of Carbon Monoxide.....	03
<i>R. I. Mladenova, M. G. Ignatova, M. K. Naydenov, N. E. Manolova, I. B. Rashkov</i> , Polyethers with 8-Hydroxy-2-quinolinyimine End-Groups: Preparation, Chelating Properties and Effect on the Development of <i>Trichoderma Viride</i> Embedded in Chitosan Films.....	12
<i>G. Angelov, Chr. Gourdon</i> , Turbulent Viscosity in Pulsed Stagewise Extraction Columns.....	24
<i>V. K. Agrawal, P. V. Khadikar</i> , Quantitative, Structure-Activity Relation-ship (QSAR) studies on non-ulcerogenic anti-inflammatory agents.....	35
<i>M. N. Moskovkina, I. P. Bangov</i> , Gas Chromatographic Retention Modeling of Alkylphenols by QSRR Approach.....	45
<i>L. A. Ljutzkanov, N. N. Kolev, T. St. Petrova</i> , Pressure Drop of Porous Wall Tubes in case of Contracting Fluids.....	62
<i>B. A. Stamboliyska, P. J. Vassileva-Boyadjieva, Y. I. Binev, E. A. Velcheva, J. A. Tsenov, Chr. Ts. Petkov, I. N. Juchnovski, I. G. Binev</i> , Correlation Analysis of Experimental vs. <i>ab initio</i> IR Frequencies and Intensities.....	70
<i>M. Valcheva-Traykova, J. Warzywoda, A. Sacco, Jr.</i> , Effect of the Free Fall Environment on the Structure of Zeolite NaA Grown in a Low Earth Orbit.....	87

## СЪДЪРЖАНИЕ

<i>Е. П. Славчева, З. Ернст, Х. Балтрушат</i> , Чувствителност на динамичен електрохимичен сензор към толуен в присъствие на въглероден оксид.....	11
<i>Р. И. Младенова, М. Г. Игнатова, М. К. Найденов, Н. Е. Манолова, И. Б. Рашков</i> , Полиетери с крайни $\delta$ -хидрокси-2-хинолил-иминни групи: получаване, хелатиращи свойства и влияние върху развитието на <i>Trichoderma viride</i> , включена в хитозанови филми.....	23
<i>Г. Ангелов, К. Гурдон</i> , Турбулентен вискозитет в стъпални екстракционни колони с пулсиращ поток.....	34
<i>В. К. Агравал, П. В. Хадикар</i> , Изследвания на количествените съот-ношения структура-активност (QSAR) за против-възпали-телни агенти непредизвикващи язва.....	44
<i>М. Н. Московкина, И. П. Бангов</i> , Моделиране на газхроматографско задържане на алкилфеноли с помощта на химометричен подход.....	61
<i>Л. А. Люцканов, Н. Н. Колев, Т. Ст. Петрова</i> , Определяне на пада на налягането при преминаване на свиваеми флуиди през стените на порьозни тръби.....	69
<i>Б. А. Стамболийска, П. Ж. Василева-Бояджиева, Ю. И. Бинев, Е. А. Велчева, Й. А. Ценов, Хр. Ц. Петков, И. Н. Юхновски, И. Г. Бинев</i> , Корелационен анализ на опитни спрямо <i>ab initio</i> честоти и интензивности на ИЧ ивици.....	86
<i>М. Вълчева-Трайкова, Ю. Важивода, А. Сако-мл.</i> , Влияние на без-тегловността върху структурата на зеолит NaA синтезиран в ниска околоземна орбита.....	95

## CONTENTS

<i>L. A. Petrov</i> , Academician <i>D. M. Shopov</i>	201
<i>S. K. Rakovski</i> , Ozone and Ecology	203
<i>K. E. Kumbilieva</i> , <i>L. A. Petrov</i> , <i>N. V. Nekrasov</i> , <i>N. A. Gaidai</i> , On Some Problems of Constructing Kinetic Models of Processes Occurring over Zeolite Catalysts	222
<i>S. Zh. Todorova</i> , <i>G. B. Kadinov</i> , Carbon Monoxide and Hydrogen Interaction on Co/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Studied by Infrared Spectroscopy	232
<i>P. Chr. Kovacheva</i> , <i>A. V. Predoeva</i> , <i>K. Chr. Arishtirova</i> , The Catalytic Impact of X Zeolites Modified with Alkali Earth Oxides in Styrene Formation	240
<i>V. I. Iliev</i> , Tin(IV) Oxide Modified with Tetraphenoxyphtalocyanines – Catalysts for Photooxidation of Chlorophenols upon Irradiation with Visible Light	249
<i>R. P. Dimitrova</i> , <i>Y. G. Neinska</i> , <i>M. I. Spasova</i> , <i>N. G. Kostova</i> , Incorporation of Vanadium Species in Beta Zeolite by Reductive Solid State Ion Exchange	261
<i>M. D. Dimitrov</i> , <i>T. St. Tsoncheva</i> , <i>Chr. I. Minchev</i> , CuO Supported on MCM41 Mesoporous Molecular Sieves: Physicochemical and Catalytic Study	270
<i>R. N. Mendoza</i> , <i>T. D. Halachev</i> , <i>R. R. Talavera</i> , <i>V. M. Castaño</i> , A Novel Method for the Immobilization of a Zinc Acetate Complex on the Surface of Silica Gel: a FT-Raman Study	277
<i>L. I. Ilieva</i> , <i>R. D. Nedyalkova</i> , <i>D. H. Andreeva</i> , Redox Properties of Gold-Ceria Catalysts Promoted by Vanadia	289
<i>A. D. Penkova</i> , <i>K. I. Hadjiivanov</i> , <i>D. G. Klissurski</i> , FTIR Study of CO Adsorption on Chromia Surfaces with Different Oxidation Degrees	298
<i>G. P. Vissokov</i> , Thermodynamic and Model Studies on the Plasmachemical Preparation of Nanostructured Catalysts for Low-Temperature Steam Conversion of Carbon Monoxide	310
<i>S. D. Genieva</i> , <i>K. M. Gyurova</i> , <i>L. T. Vlaev</i> , Non-Isothermal Kinetics of Dehydration of Some Selenites	321
<i>L. T. Vlaev</i> , <i>M. P. Tavlieva</i> , Conductivity of Aqueous Solutions of Potassium Tellurite	330
<i>A. E. Eliyas</i> , <i>G. Munteanu</i> , <i>L. A. Petrov</i> , A Comparative Study of the Volume of Normal-Paraffin Molecules by Semi-Empirical and <i>ab-initio</i> Quantum Mechanical Methods	338
<i>V. Chihaiia</i> , <i>V. D. Alexiev</i> , <i>N. M. Neshev</i> , <i>G. Munteanu</i> , <i>C. I. Lepadatu</i> , <i>W.-K. Min</i> , <i>S.-H. Suh</i> , Influence of Electronic Correlation Effects on Bulk MgO Energy Properties	349
<i>V. Chihaiia</i> , <i>V. D. Alexiev</i> , <i>N. M. Neshev</i> , <i>G. Munteanu</i> , <i>C. I. Lepadatu</i> , <i>W.-K. Min</i> , <i>S.-H. Suh</i> , Influence of the Basis Sets and Numerical Accuracy Control on Bulk MgO Energy Properties. Hartree-Fock Calculations	362
<i>D. G. Paneva</i> , <i>M. Jovanović</i> , <i>T. S. Tsoncheva</i> , <i>L. Matić</i> , <i>B. N. Kunev</i> , <i>A. Terlecki-Baričević</i> , <i>I. G. Mitov</i> , <i>Chr. I. Minchev</i> , Nano-Sized Iron Oxide Catalysts Supported on Activated Carbon	384
<i>M. V. Gabrovska</i> , <i>R. M. Edreva-Kardjieva</i> , <i>V. D. Idakiev</i> , <i>B. N. Kunev</i> , Influence of Mg on the Structure and the Properties of Ni-Al Takovite-Like Material	395
<i>A. E. Eliyas</i> , <i>L. A. Petrov</i> , Estimation of Diffusion Influence on the Block Oscillations During the Catalytic Oxidation of Formic Acid	405
<i>V. D. Alexiev</i> , <i>Ch. D. Vladov</i> , <i>A. A. Dotzeva</i> , <i>L. A. Petrov</i> , Catalytic Activity of Nickel- and Alkali-Intercalated MoS <sub>2</sub> in Hydro-desulfurization Reaction	418
<i>E. D. Manova</i> , <i>R. Clement</i> , Catalytic Sulfide Ions Oxidation over Nickel-Cadmium-Phosphorous-Sulphide Layered Compounds	426
<i>P. M. Konova</i> , <i>A. I. Naydenov</i> , <i>D. R. Mehanjiev</i> , Catalytic Decomposition of Ozone on Gold-Containing Au/TiO <sub>2</sub> and Au/ZrO <sub>2</sub> Catalysts	437
<i>D. A. Nikolova</i> , <i>T. P. Grozeva</i> , <i>R. M. Edreva-Karjieva</i> , Effect of K on the Catalytic Activity of NiO/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> for Water Gas Shift Reaction in the presence of H <sub>2</sub> S	445
<i>M. G. Deneva</i> , <i>S. K. Rakovski</i> , Ozonation in a Bubbling Reactor – Analysis of the Equations	454

	Describing the Processes of Physical Absorption with a Simultaneously Running Chemical Reaction	
<i>R. M. Edreva-Kardjieva, V. D. Alexiev, D. A. Nikolova, M. V. Gab-rovskva, T. P. Grozeva,</i>	Comparative Study of Alkali and Nickel Deposited and Intercalated MoS <sub>2</sub> : Structure and Catalytic Activity in Water-Gas Shift Reaction	461
<i>D. G. Filkova, R. M. Kardjieva, N. Dragan, D. Crisan, L. A. Petrov,</i>	XRD Study of Mixed Oxides between Neodymium and Alkaline Earth Elements Used as Catalysts for the Oxidative Coupling of Methane	469
<i>M. G. Shopska, I. Zh. Shtereva, G. B. Kadinov,</i>	Influence of the Pretreatment on the Formation of Metal Particles in Alumina-Supported Co-Pd Catalysts	476
<i>M. P. Anachkov, S. K. Rakovski,</i>	Enthalpy of the Thermal Decomposition of Functional Groups of Peroxide Type, Formed by Ozonolysis of Diene Rubbers in Solution	486
<i>A. A. Spojakina, E. U. Kraveva, K. Jiratova, J. Kocianova, L. A. Petrov,</i>	FePMo <sub>12</sub> O <sub>40</sub> Heteropolycompound in Preparation of Hydro-desulfurization Catalysts	495
<i>N. G. Kostova, A. A. Spojakina, Chr. I. Minchev, V. P. Mavrodinova, Y. G. Neinska, M. D. Dimitrov,</i>	Si-MCM-41 Supported HDS Catalysts Prepared with Different Molybdenum Sources	505
<i>Ch. Ts. Bonev,</i>	Characterization of Supported Palladium-Lead Catalysts by Chemisorption and Infrared Spectroscopy	516

## СЪДЪРЖАНИЕ

<i>Л. А. Петров</i> , Академик Д. М. Шопов	201
<i>С. К. Раковски</i> , Озон и екология	221
<i>К. Е. Кумбилиева, Н. В. Некрасов, Н. А. Гайдай, Л. А. Петров</i> , Проблеми при построяването на кинетични модели на процеси върху зеолитни катализатори	231
<i>С. Ж. Тодорова, Г. Б. Кадинов</i> , Взаимодействие на въглероден оксид и водород върху $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3$ изследвано с инфрачервена спектроскопия	239
<i>П. Хр. Ковачева, Ал. В. Предоева, К. Хр. Арищирова</i> , Катали-тично въздействие на X зеолити, модифицирани с алкало-земни оксиди, върху образуването на стирен	248
<i>В. И. Илиев</i> , Калай (IV) оксид модифициран с тетрафеноксифталоцианинови комплекси – катализатори за фотоокисление на хлорфеноли при облъчване с видима светлина	260
<i>Р. П. Димитрова, Я. Г. Нейнска, М. И. Спасова, Н. Г. Костова</i> , Въвеждане на ванадиеви йони в бета зеолити посредством твърдофазен йонен обмен	269
<i>М. Д. Димитров, Т. Ст. Цончева, Хр. Ив. Минчев</i> , Физикохимично и каталитично изследване на модифицирани с $\text{CuO}$ мезопорести материали от типа MCM-41	276
<i>Р. Н. Мендоса, Т. Д. Халачев, Р. Р. Талавера, В. М. Кастаньо</i> , Нов метод за имобилизиране на цинков ацетатен комплекс на повърхността на силикагел: Изследване с раманова спектроскопия	288
<i>Л. И. Илиева, Р. Н. Недялкова, Д. Хр. Андреева</i> , Оксиредукционни свойства на златоциериеви катализатори, промотирани с ванадиев оксид	297
<i>А. Д. Пенкова, К. И. Хаджииванов, Д. Г. Клисурски</i> , ИЧ-спектроскопско изучаване на повърхността на хромен оксид, подложен на различна предварителна окислително-редукционна обработка	309
<i>Г. П. Високов</i> , Термодинамични и моделни изследвания върху плазмохимичното получаване на наноструктурирани катализатори за нискотемпературна конверсия на въглероден оксид с водна пара	320
<i>С. Д. Гениева, К. М. Гюрова, Л. Т. Влаев</i> , Неизотермична кинетика на дехидратацията на някои селенити	329
<i>Л. Т. Влаев, М. П. Тавлиева</i> , Електропроводност на водни разтвори на калиев телурит	337
<i>А. Е. Елияс, Г. Мунтяну, Л. А. Петров</i> , Сравнително изследване на обемите на нормални парафинови молекули чрез полу-емпирични и <i>ab initio</i> квантово механични методи	348
<i>В. Чихая, В. Д. Алексиев, Н. М. Нешев, Г. Мунтяну, К. И. Лепадату, У.-К. Мин, С.-Х. Су</i> , Влияние на електронната корелация върху енергетичните свойства на $\text{MgO}$	361
<i>В. Чихая, В. Д. Алексиев, Н. М. Нешев, Г. Мунтяну, К. И. Лепадату, У.-К. Мин, С.-Х. Су</i> , Влияние на базисните функции и точността на параметрите на пресмятане върху енергетичните свойства на $\text{MgO}$ . Изчисления по метода на Хартри-Фок	383
<i>Д. Г. Панева, М. Р. Йованович, Т. С. Цончева, Л. Д. Матич, Б. Н. Кунев, А. В. Терлецки-Баричевич, И. Г. Митов, Хр. И. Минчев</i> , Катализатори от наноразмерен железен оксид наносени на активен въглен	394
<i>М. В. Габровска, Р. М. Едрева-Кърджиева, В. Д. Идакиев, Б. Н. Кунев</i> , Влияние на $\text{Mg}$ върху структурата и свойствата на $\text{Ni-Al}$ таковито-подобен материал	404
<i>А. Е. Елияс, Л. А. Петров</i> , Оденка на влиянието на дифузията върху блокови осцилации при каталитичното окисление на мравчена киселина	417
<i>В. Д. Алексиев, Ч. Д. Владов, А. А. Доцева, Л. А. Петров</i> , Каталитична активност на $\text{MoS}_2$ с интеркалирани никел и алкални йони в реакция на хидродесулфуриране	425
<i>Е. Д. Манова, Р. Клемент</i> , Каталитично окисление на сулфидни йони върху никел-кадмий-фосфор-сулфидни слоеви съединения	436
<i>П. М. Конова, А. И. Найденов, Д. Р. Механджиев</i> , Каталитично разлагане на озон върху злато съдържащи катализатори $\text{Au}/\text{TiO}_2$ и $\text{Au}/\text{ZrO}_2$	444
<i>Д. А. Николова, Т. П. Грозева, Р. М. Едрева-Кърджиева</i> , Влияние на калия върху	453

- каталитичната активност на NiO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> за реакцията на конверсия на CO с водна пара в присъствие на H<sub>2</sub>S
- М. Г. Денева, С. К. Раковски*, Озониране в барботажен реактор – анализ на уравненията описващи процесите на физическа абсорбция с едновременно протичане на химична реакция 460
- Р. М. Едрева-Кърджиева, В. Д. Алексиев, Д. А. Николова, М. В. Габровска, Т. П. Грозева*, Сравнително изследване на нане-сени и интеркалирани в MoS<sub>2</sub> алкални и никелови йони: структура и каталитична активност в реакцията на кон-версия на CO с водна пара 468
- Д. Г. Филкова, Р. М. Едрева-Кърджиева, Н. Драган, Д. Кришан, Л. А. Петров*, Рентгеноструктурно изследване на смесени оксиди на неодим и алкалоземни елементи, използвани като катализатори за окислително съчетаване на метан 475
- М. Г. Шопска, И. Ж. Щерева, Г. Б. Кадинов*, Влияние на предва-рителната обработка върху формирането на металните частици в Co-Pd катализатори нанесени на Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 485
- М. П. Аначков, С. К. Раковски*, Енталпия на термичната деструк-ция на функционални групи от прекисен тип, получени при озонолизата на диенови еластомери в разтвор 494
- А. А. Спужакина, Е. Ю. Кралева, К. Иратова, Я. Косянова, Л. А. Петров*, Използване на FePMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub> хетерополисъедине-ние за приготвяне на катализатори за хидрообезсерване 504
- Н. Г. Костова, А. А. Спужакина, Хр. И. Минчев, В. П. Мавроди-нова, Я. Г. Нейнска, М. Д. Димитров*, Катализатори за хидродесулфуриране нанесени върху Si-MCM-41. Влия-ние на молибденовия прекурсор 515
- Ч. Ц. Бонев*, Охарактеризиране на нанесени паладиеви и пала-диево-оловни катализатори чрез хемисорбция и инфра-червена спектроскопия 522