

До г-н Декана
на Химически факултет
при ПУ "П. Хилендарски"

ДОКЛАД

от доц. д-р Елена Г. Хорозова
Ръководител катедра Физикохимия

Г-н Декан,

Моля, факултетният съвет да приеме учебни програми по дисциплината *Приложна колоидна химия* (избираем курс) с лектор гл. ас. д-р Димитър Петров за следните специалности с ОКС – бакалавър:

1. Учебна програма по Приложна колоидна химия (избираем курс) за спец. Медицинска химия в 8-ми семестър с хорариум 2/ 0/ 0.;

2. Учебна програма по Приложна колоидна химия (избираем курс) за спец. Химия – задочно обучение (стар учебен план) в 8-ми семестър с хорариум 1/ 0/ 0.

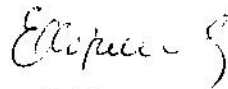
Учебните програми са разгледани и обсъдени на КС на 18. 02. 2016 год. и бяха приети от членовете на катедрата.

Прилагам:

1. Стандартизиран формуляр с описание на програмите;
2. Препис – извлечение от Протокол № 135/ 18. 02. 2016 г.

18. 02. 2016 г.
Пловдив

Р-л катедра:


доц. д-р Е. Хорозова

Препис – извлечение

от заседание на кат. Физикохимия

ПРОТОКОЛ № 135

Днес, 18.02.2016 г. в катедра Физикохимия се проведе Катедрен съвет.

Присъстват: доц. д-р Е. Хорозова, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Н. Димчева, доц. д-р В. Делчев, гл. ас. д-р Д. Петров, ас. П. Кънчева, химик М. Георгиева. Отсъстват ас. В. Иванова / в майчинство / и хим. Недялка Делчева / в болнични /.

Катедреният съвет протече при следния дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По 1.т. бе направено предложение да се приемат от Факултетния съвет програми по дисциплината Приложна колоидна химия / избираем курс / с лектор гл. ас. д-р Д. Петров за следните специалности с ОКС – бакалавър:

1. Учебна програма по Приложна колоидна химия (избираем курс) за спец. Медицинска химия в 8-ми семестър с хорариум 2/ 0/ 0.;

2. Учебна програма по Приложна колоидна химия (избираем курс) за спец. Химия – задочно обучение (стар учебен план) в 8-ми семестър с хорариум 1/ 0/ 0.

След направеното обсъждане програмата бе единодушно приета от членовете на Катедрения съвет.

По т.2.....

18.02.2016 г.

Протоколчик:

/ М. Георгиева /



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централa: (032) 261 261
Декaн: (032) 261 402 фaкс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Физикохимия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Химия – задочно обучение (стар учебен план).

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Приложна колоидна химия

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

четвърта

Семестър

VIII

Брой ECTS кредити

2

Име на лектора

гл. ас. д-р Димитър Петров

Анотация

Целта на курса ПРИЛОЖНА КОЛОИДНА ХИМИЯ е да се подготвят студентите за приложенията на колоидхимичните системи в различни области на практиката, като екология, медицина, хранителна технология, химична промишленост, биотехнология, техника и други; съвременните приложения на колоидни системи, образувани от наночастици са обсъдени в много от тях.

Размерът на частиците на дисперсната фаза и явленията, протичащи на междупазовата повърхност се явяват основни свързващи фактори при разглеждане на приложението на колоидно дисперсните системи. Методите за определяне на размера на частиците и електрофоретичните приложения се изучават в отделни теми. Явленията на междупазовата повърхност се разглеждат както във връзка със стабилността на дисперсията (храни, прахове и омокряне), така и с отделни техни свойства (магнитни свойства при нанопреносители на лекарства). Микроемулсиите са представени с опростена фазова диаграма с области на стабилност. Разглеждат се и различни ефективни методи за приложението на последните в различни технологии, както и за детоксифициране на околната среда. В почти всички случаи са посочени химичният състав и връзката му с изгражданата колоидхимична структура на реалния обект. Аерозолите се изучават чрез механизмите при вдишване на аерозолни частици и аерозолни разпръскватели.

Разгледани са и някои от най-перспективните възможности за приложение на колоидно-дисперсните системи като преносители на лекарства, някои терапевтични приложения, пренос на вещества в емулсии, биосвързване на нанокристали, биосуспензии и др.

Кръвта като колоидна дисперсия е разгледана като ненютонова система с течна дисперсна среда, а дифузията на лекарства през кожата – чрез определени физикохимични фактори. Наноразмерите присъстват не само в много приложения на наночастици, но и в реални обекти, като биолоиди, слоеве в биомембрани, „четка“ на тънките черва и др.

В курса са взети предвид нивото на подготовка и необходимите предварителни познания от основните курсове по физикохимия и колоидна химия. Лекционният курс има междудисциплинарен характер, материалът е даден в текстова форма, като диаграмно-илюстративният подход е основно средство в обсъждането, а математическите извеждания почти отсъстват.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- понятия за наночастици, наногели, биосуспензии, микроемулсии и техни основни отнасяния като колоидни системи;
- различни приложения на колоидните дисперсии в различни области на практиката като екология, медицина, хранителни технологии, био- и нанотехнологии и др.
- приложение на ПАВ, като детергенти в козметичната промишленост, медицината, фармацията и др. и механизма на измивното им действие. Ще се познава връзката свойства – приложение;
- някои биологични приложения на наночастици;

- приложение на микроемулсиите като преносители на вещества;
- механизма на пренос на лекарства от наногели;
- приложение на някои наноразмерни колоидни системи като преносители на лекарства;
- методи за определяне размера на колоидните частици;
- кръвта като колоидно-дисперсна система и основни нейни характеристики;
- механизма на пенообразуване и разреждане на спиртни напитки;
- строеж и колоидхимични свойства на хранителни продукти, разглеждани като колоидни дисперсии.

Начин на преподаване

Аудиторно: 30 часа

- Лекции - 30 часа

Извънаудиторно: 45 часа

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: **Физикохимия I и II част, Органична химия, Аналитична химия, Обща и неорганична химия.**

Студентите трябва да знаят и/или да могат:

- фундаментални знания по посочените химически дисциплини;
- да са усвоили термодинамичния и кинетичен подход при описанието на различни химични системи и реакции;
- да умеят да представят данни в табличен и графичен вид (чрез използване на Excel), да ги анализират и да правят изводи.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Екологичен катализ, Биокатализ и биоелектрохимия, Химия на отровните вещества.

Техническо осигуряване на обучението

- Мултимедия, лаптоп

Съдържание на курса

Обучението по дисциплината **Приложна колоидна химия** включва:

- Лекционен курс (2 часа/през седмица). В лекционния курс се разглеждат темите: Храни-колоидни дисперсии; Прахове и омокряне; Биосуспензии; Биологични и биомедицински приложения на колоидни наночастици; Приложения на микроемулсиите и наногелите; Методи за определяне размерите на частиците; Приложения на ПАВ; Други дисперсии - кръв.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции

Тема:

1. Въведение. Сравнително разглеждане на колоидни дисперсии и наносистеми. Особенности и специфични ефекти при наносистеми. (1 час)
2. Омокряне – определение, видове. Омокрящи вещества. Прахове във фармацията. (2 часа)
3. Биосуспензии. Флотация на биосуспензии. Флокуланти за биосуспензии. (1 час)
4. Приложения на колоидни и наночастици – терапевтични приложения. Колоидни нанопреносители на лекарства. Биосвързване на нанокристали. (2 часа)
5. Микроемулсии – основни приложения. Пренос на вещества в емулсии. (1 час)
6. Хидрогели. Макрогели на природни полимери. Гели на лигавицата. Наногели – преносители на лекарства. (1 час)
7. Дифузия през кожата. Физико-химични фактори влияещи върху дифузията. (1 час)
8. Размери на частиците. Методи за определяне размерите на частиците. Вдишване на аерозолни частици. (2 часа)
9. Други дисперсии. Кръвта като колоидна дисперсия. Аерозолни разпръскватели. (2 часа)
10. Измивно действие и ПАВ. Пенообразуване и спиртни напитки. (2 часа)

Общо: 15

Б/ Семинарни занятия

Не

В/ Лабораторни упражнения

Не

В/ Самостоятелна подготовка:

Самостоятелната подготовка включва:

- Подготовка върху теоретичната част на лекционния материал;
- Подготовка за изпит.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
М. Мачкова, А. Гиргинов	Колоидна химия	ХТМУ-София	2013
А. Д. Зимон, А. Н. Павлов	Коллоидная химия наночастиц	Научный мир, Москва	2012
P. W. Atkins, J. De Paula	Physical Chemistry for the Life Sciences	Oxford University Press	2006

A. T. Florence, D. Attwood	Physicochemical principles of pharmacy	Pharmaceutical Press, London, 5 nd ed.,	2011
R. Mortimer	Physical Chemistry, 3-rd Edition	Elsevier	2008
A. Шелудко	Колоидна химия	Наука и Изкуство	1978

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Обучението по дисциплината се осъществява чрез лекционен курс. Преподаването на всяка тема от програмата е във вид на лекция с продължителност 2 учебни часа.

Методи и критерии на оценяване

Изпитът е писмен-активен тест, включващ тестови въпроси от всички теми от учебната програма или разработване на две теми с продължителност 3 астрономически часа.

Студентите се информират за резултатите от писмените си работи и могат да се запознаят с мотивите за поставената оценка, което се провежда при дискусия на всеки студент с преподавателя.

Всички писмени работи се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на изпита.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

гл. ас. д-р Димитър Петров



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централa: (032) 261 261
Декaн: (032) 261 402 фaкс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Физикохимия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Медицинска химия.

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Приложна колоидна химия

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

четвърта

Семестър

VIII

Брой ECTS кредити

2

Име на лектора

гл. ас. д-р Димитър Петров

Анотация

Целта на курса ПРИЛОЖНА КОЛОИДНА ХИМИЯ е да се подготвят студентите за приложенията на колоидхимичните системи в различни области на практиката, като екология, медицина, хранителна технология, химична промишленост, биотехнология, техника и други; съвременните приложения на колоидни системи, образувани от наночастици са обсъдени в много от тях.

Размерът на частиците на дисперсната фаза и явленията, протичащи на междупазовата повърхност се явяват основни свързващи фактори при разглеждане на приложението на колоидно дисперсните системи. Методите за определяне на размера на частиците и електрофоретичните приложения се изучават в отделни теми. Явленията на междупазовата повърхност се разглеждат както във връзка със стабилността на дисперсията (храни, прахове и омекряне), така и с отделни техни свойства (магнитни свойства при нанопреносители на лекарства). Микроемулсиите са представени с опростена фазова диаграма с области на стабилност. Разглеждат се и различни ефективни методи за приложението на последните в различни технологии, както и за детоксифициране на околната среда. В почти всички случаи са посочени химичният състав и връзката му с изгражданата колоидхимична структура на реалния обект. Аерозолите се изучават чрез механизмите при вдишване на аерозолни частици и аерозолни разпръскватели.

Разгледани са и някои от най-перспективните възможности за приложение на колоидно-дисперсните системи като преносители на лекарства, някои терапевтични приложения, пренос на вещества в емулсии, биосвързване на нанокристали, биосуспензии и др.

Кръвта като колоидна дисперсия е разгледана като ненютонова система с течна дисперсна среда, а дифузията на лекарства през кожата – чрез определени физикохимични фактори. Наноразмерите присъстват не само в много приложения на наночастици, но и в реални обекти, като биоколоиди, слоеве в биомембрани, „четка“ на тънките черва и др.

В курса са взети предвид нивото на подготовка и необходимите предварителни познания от основните курсове по физикохимия и колоидна химия. Лекционният курс има междудисциплинарен характер, материалът е даден в текстова форма, като диаграмно-илюстративният подход е основно средство в обсъждането, а математическите извеждания почти отсъстват.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- понятия за наночастици, наногели, биосуспензии, микроемулсии и техни основни отнасяния като колоидни системи;
- различни приложения на колоидните дисперсии в различни области на практиката като екология, медицина, хранителни технологии, био- и нанотехнологии и др.
- приложение на ПАВ, като детергенти в козметичната промишленост, медицината, фармацията и др. и механизма на измивното им действие. Ще се познава връзката свойства – приложение;
- някои биологични приложения на наночастици;

- приложение на микроемулсиите като преносители на вещества;
- механизма на пренос на лекарства от наногели;
- приложение на някои наноразмерни колоидни системи като преносители на лекарства;
- методи за определяне размера на колоидните частици;
- кръвта като колоидно-дисперсна система и основни нейни характеристики;
- механизма на пенообразуване и разреждане на спиртни напитки;
- строеж и колоидхимични свойства на хранителни продукти, разглеждани като колоидни дисперсии.

Начин на преподаване

Аудиторно: 30 часа

- Лекции - 30 часа

Извънаудиторно: 30 часа

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: **Физикохимия I и II част, Органична химия, Аналитична химия, Обща и неорганична химия.**

Студентите трябва да знаят и/или да могат:

- фундаментални знания по посочените химически дисциплини;
- да са усвоили термодинамичния и кинетичен подход при описанието на различни химични системи и реакции;
- да умеят да представят данни в табличен и графичен вид (чрез използване на Excel), да ги анализират и да правят изводи.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Екологичен катализ, Биокатализ и биоелектрохимия, Химия на отровните вещества.

Техническо осигуряване на обучението

- Мултимедия, лаптоп

Съдържание на курса

Обучението по дисциплината **Приложна колоидна химия** включва:

- Лекционен курс (2 часа/седмично). В лекционния курс се разглеждат темите: Храни-колоидни дисперсии; Прахове и омокряне; Биосуспензии; Биологични и биомедицински приложения на колоидни наночастици; Приложения на микроемулсиите и наногелите; Методи за определяне размерите на частиците; Приложения на ПАВ; Други дисперсии - кръв.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции

Тема:

1. Въведение. Сравнително разглеждане на колоидни дисперсии и наносистеми. Особенности и специфични ефекти при наносистеми. (2 часа)
2. Колоидни дисперсии – храни. Строеж и свойства. (2 часа)
3. Прахове и омокряне. Омокряне – определение, видове. Омокрящи вещества. Прахове във фармацията. Прахове – хранителни продукти. (2 часа)
4. Биосуспензии. Суспензии от микроорганизми. Флотация на биосуспензии. Флоккуланти за биосуспензии. (2 часа)
5. Приложения на колоидни и наночастици – терапевтични приложения. Колоидни нанопреносители на лекарства. Биосвързване на нанокристали. (4 часа)
6. Микроемулсии – основни приложения. Пренос на вещества в емулсии. (4 часа)
7. Хидрогели. Макрогели на природни полимери. Гели на лигавицата. Наногели – преносители на лекарства. (3 часа)
8. Дифузия през кожата. Физико-химични фактори влияещи върху дифузията. (3 часа)
9. Размери на частиците. Методи за определяне размерите на частиците. Вдишване на аерозолни частици. (2 часа)
10. Електрофоретични приложения. Метод на подвижната граница. Гел – електрофореза, имуноелектрофореза. (2 часа)
11. Други дисперсии. Кръвта като колоидна дисперсия. Аерозолни разпръскватели. (2 часа)
12. Измивно действие и ПАВ. Пенообразуване и спиртни напитки. (2 часа)

Общо: 30

Б/ Семинарни занятия

Не

В/ Лабораторни упражнения

Не

В/ Самостоятелна подготовка:

Самостоятелната подготовка включва:

- Подготовка върху теоретичната част на лекционния материал;
- Подготовка за изпит.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
М. Мачкова, А. Гиргинов	Колоидна химия	ХТМУ-София	2013
А. Д. Зимон, А. Н. Павлов	Коллоидная химия наночастиц	Научный мир, Москва	2012
P. W. Atkins, J. De Paula	Physical Chemistry for the Life Sciences	Oxford University Press	2006
A. T. Florence, D. Attwood	Physicochemical principles of pharmacy	Pharmaceutical Press, London, 5 nd ed.,	2011
R. Mortimer	Physical Chemistry, 3-rd Edition	Elsevier	2008
А. Шелудко	Колоидна химия	Наука и Изкуство	1978

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Обучението по дисциплината се осъществява чрез лекционен курс. Преподаването на всяка тема от програмата е във вид на лекция с продължителност 2 учебни часа.

Методи и критерии на оценяване

Изпитът е писмен-активен тест, включващ тестови въпроси от всички теми от учебната програма или разработване на две теми с продължителност 3 астрономически часа.

Студентите се информират за резултатите от писмените си работи и могат да се запознаят с мотивите за поставената оценка, което се провежда при дискусия на всеки студент с преподавателя.

Всички писмени работи се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на изпита.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

гл. ас. д-р Димитър Петров

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия” бе разгледан отчетът на задочен докторант **Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова** за третата година от докторантурата ѝ. Научният ръководител доц. д-р Веселин Кметов запозна членовете на катедрата със становището си и предложи оценка за третата година на докторантурата **Добър (4)**. След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научния ръководител бяха бе единодушно приети.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчета на **Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова** с оценка **Добър (4)**.

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 9.03.2016.
2. Отчет на докторант *Диляна Чакърва-Димитрова* за изпълнение на индивидуалния план за третата година на докторантурата

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова за третата година от нейната докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 9 гласа "за" и по предложение на научния ръководител доц. Веселин Кметов ѝ беше дадена оценка Добър (4).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС да приеме отчета на **Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова** за третата година от докторантурата ѝ и да ѝ бъде дадена оценка **Добър (4)**.

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Веселин Йорданов Кметов,
научен ръководител, на **Диляна Костадинова Чакърова-Димитрова**
редовен (задочен) докторант към катедра Аналитична химия и компютърна химия
за извършените дейности през третата година (03.2015-03.2016)

по тема: **Развитие на аналитични методи за определяне на активни вещества в препарати за растителна защита**

Докторант Диляна Димитрова, е зачислена в редовна докторантура по Аналитична химия със Заповед на Ректора Р33-693 от 21.02.2013 г. Както и през предходните две години, тя продължи да работи като Ръководител на *Изпитвателна лаборатория към Агрива АД*, и това отново бе причина тя да не може да отделя достатъчно време за подготовката на своята дисертация. И през третата година се натрупа забавяне по изпълнението на задачите от индивидуалния план. Това наложи да се вземе решение за трансформиране на формата на докторантурата от РЕДОВНА към ЗАДОЧНА. Това бе сторено (след обсъждане в Катедрата и в Факултетния съвет на Химическия факултет) със Заповед на Ректора Р33-4672 от 1.10.2015г. В последствие бе променен и индивидуалният план, който вече предвижда и четвърта година на обучение по докторантурата на Диляна Димитрова. Същият план бе приет на Катедрен съвет и Факултетен съвет и утвърден от Ректора.

За отчетния период от третата година на докторантурата Диляна Димитрова продължи работата си по разработването и оптимизирането на метод за определяне на сяра в амонячни разтвори на биоцида цинеб с цел индиректно определяне на активната субстанция във формулати произведени в Агрива АД.

Уточнени са модели за оценка на бюджета на неопределеност на класическия CIPAC 25 и на ICP-OES методи. Експериментално е потвърдено, че разработеният нов инструментален метод е много добра алтернатива за изпитвания на активната субстанция цинеб, като постига съвместими резултати с тези на класическия подход, но с по-добра неопределеност. Новият метод се отличава и със подобрени характеристики в контекста на „Зелена аналитична химия“, поради избягването на опасни реагенти, намалена консумация на реактиви и производителност на изпитвателната процедура.

И през третата година докторант Димитрова натрупа значително количество данни, но продължава да изостава в интерпретирането и експертната оценка на наблюдаваните ефекти и тенденции.

За изпиталата година Димитрова има участие в международен семинар - Съвременни методи за анализ и контрол на храни и околна среда, организирана от ACM2, Thermo Fisher Scientific и Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“ на 20.05.2015 г. Там бе представен постер: Д. Чакърова-Димитрова, В. Кметов „*Оценяване на комбинираната неопределеност на резултатите при определяне на активна субстанция Цинеб, получени чрез CIPAC 25 метод и ICP-OES метод*“. Резюмето бе включено в книгката от материалите на семинара.

Докторантката бе заявила и участие с доклад на 3-та Научна конференция за студенти и докторанти „ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА В ХИМИЯТА“, която се проведе на 21-22 ноември 2016 г. в ПУ „Паисий Хилендарски“, на тема „*Оптимизиране на метод за индиректно определяне на активно вещество Цинеб чрез ICP-OES измерване на сяра*“. Резюмето на работата е отпечатано в материалите на конференцията, но поради промяна на първоначално обявената дата за провеждане на конференцията, докладът не бе изнесен (Димитрова бе служебно ангажирана в Агрива по време на конференцията).

През октомври 2015 г. по темата на Димитрова започна работа и дипломат Йоана Чачева, с която проведеха съвместни изследвания върху възможността за прилагане на метода на вътрешният стандарт при ICP-OES определяне на сяра с цел намаляване на дрейфа на чувствителността.

От началото на 2016 година Димитрова работи по изготвяне на статия на английски език.

Препоръки:

Да интензифицира работата си по систематизирането и публикуването на резултатите от натрупаната експериментална работа.

Да използва четвъртата година за оформяне на дисертационния труд.

ДА СЕ ПРЕЦИЗИРА ТЕМАТА от:

“Развитие на аналитични методи за определяне на активни вещества в препарати за растителна защита”

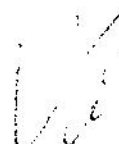
на:

„РАЗРАБОТВАНЕ НА МЕТОД ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ АКТИВНОТО ВЕЩЕСТВО В БИОЦИДА ЦИНЕБ ЧРЕЗ ICP-OES“

Въз основа на гореизложеното, предлагам Катедрения съвет на КАХКХ и Факултетния съвет на ХФ, да приемат ДОБРА оценка за работата на докторант Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова за третата година на докторантурата.

02 Март 2016 г.

С уважение:



Доц. д-р В. Кметов

ОТЧЕТ

на Диляна Костадинова Чакърлова-Димитрова
задочен докторант към катедра Аналитична химия и компютърна химия за
извършените дейности през периода 03.2015 г. - 02.2016 г.

Тема на докторантурата:

Развитие на аналитични методи за определяне на активни вещества в
препарати за растителна защита

Съгласно работният план за третата година от докторантурата са предвидени следните
дейности:

Наименование на работите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2015 Юли 2015	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Валидиране и оптимизиране на създадените аналитични методи	Консултации и сам. работа 180 h	Април – Декември 2015	Докладване на работата
Изготвяне на научни публикации работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 450 h	Януари 2016 Март 2016	Предадена научна разработка
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти – инструментални методи за анализ - хроматографски анализ	Лаб. 30 h	Март 2016 Октомври 2016	Упражнения със студенти

Със заповед на ректора No Pзз-4672 от 1.10.2015г. преминах на задочна форма на обучение.

По отношение на работния план е изпълнено следното:

I. Експериментална работа

1. Оценени са и са сравнени комбинираните неопределености на резултатите при определяне на активна субстанция Цинеб, получени чрез CIPAC 25 метод и ICP-OES метод.

Разработени са моделни уравнения на класическия CIPAC 25 метод и ICP-OES метода, включващи възможните величини с принос към неопределеността на съответния метод.

Съгласно EURACHEM/CITAC GUIDE CG4 – QUAM:2012 са изчислени неопределеностите на тези величини. Изготвени са таблични модели за изчисляване на комбинираните неопределености на методите чрез подхода на Крагтен. Идентифицирани са приносите на входните величини към резултатната комбинирана неопределеност.

CIPAC 25 метод:

$$A.I.\% = \frac{(A - B) \cdot M \cdot MmZb \cdot K}{m \cdot 1000} \cdot 100$$

Където:

A = количеството изразходен титрант (йоден разтвор в ml) до еквивалентния пункт при титруване на проба

B = количеството изразходен титрант (йоден разтвор в ml) до еквивалентния пункт при титруване на празна проба

M = моларност на титранта по отношение на I2, mol/l

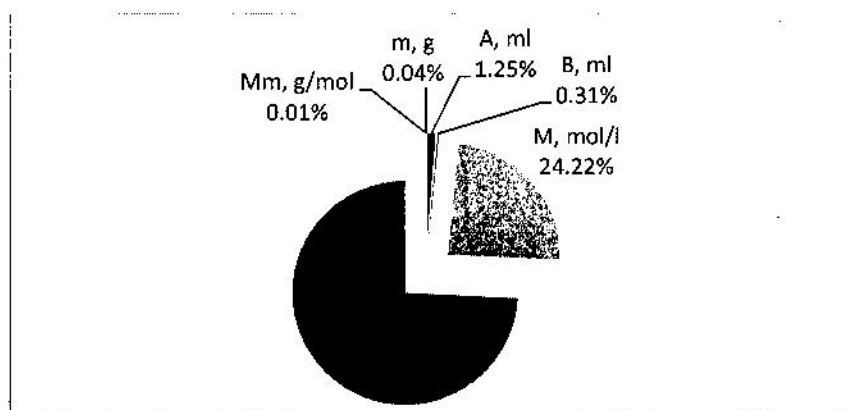
Mm = относителна моларна маса на цинеба в g/mol – 275,756

m = масата в g

K = фактор на апаратурата на Кларк – приема се за 1

X	X average	u_s	u_s_r %	A, ml	B, ml	M, mol/l	K	Mm, g/mol	m, g
A, ml	22,25	0,02	0,1	22,25	22,25	22,25	22,25	22,25	22,25
B, ml	0,2	0,01	5,0	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2
M, mol/l	0,05	0,0002	0,4	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
K	1	0,007	0,7	1	1	1	1	1	1
Mm, g/mol	275,756	0,023	0,0083	275,756	275,756	275,756	275,756	275,756	275,756
m, g	0,3145	0,00005	0,016	0,3145	0,3145	0,3145	0,3145	0,3145	0,3145
A.I. %	96,76	96,62	97,05	97,34	96,68	96,65			
U±	Sum(qi-q̄)²	(qi-q̄)²		-0,08768	0,04384	-0,38667	-0,67668	-0,0080628	0,015366
		(qi-q̄)²		0,007688	0,001922	0,149515	0,457891	6,5009E-05	0,000236
				A, ml	B, ml	M, mol/l	K	Mm, g/mol	m, g
				1,25%	0,31%	24,22%	74,17%	0,01%	0,04%

Резултат: 96.67% ± 1.60%



Основен принос в неопределеността внася апаратурата.

Приноса от неопределеността на моларната маса е незначителен и може да се пренебрегне.

ICP-OES метод:

$$A.I. \% = \frac{C_z \cdot V_{pr} \cdot m_{2pr} \cdot M_m Z_b}{m_{pr} \cdot m_{1pr} \cdot 4 \cdot A_m S} \cdot 100$$

Където:

C_z = концентрацията на пробата, mg/ml

V_{pr} = първоначален обем на разтваряне на пробата, ml

m_{1pr} = масата на взетото количество проба, g

m_{2pr} = крайна маса на пробата, g

M_m = относителна моларна маса на цинеб, g/mol

A_m = атомната маса на сярата, g/mol

m = масата на пробата, mg

C_z е изчислена по метода на ограничаващите стандарти:

$$C_z \text{ mg/l} = \frac{C_1 \left(I_2 - \left(I_z - \frac{I_0}{F} \right) \right) + C_2 \left(\left(I_z - \frac{I_0}{F} \right) - I_1 \right)}{I_2 - I_1}$$

Където:

I_z = интензитета на пробата цинеб, cps

I_0 = интензитета на естрахираната проба цинеб, cps

I_1 = интензитета на стандарта с ниска концентрация, cps

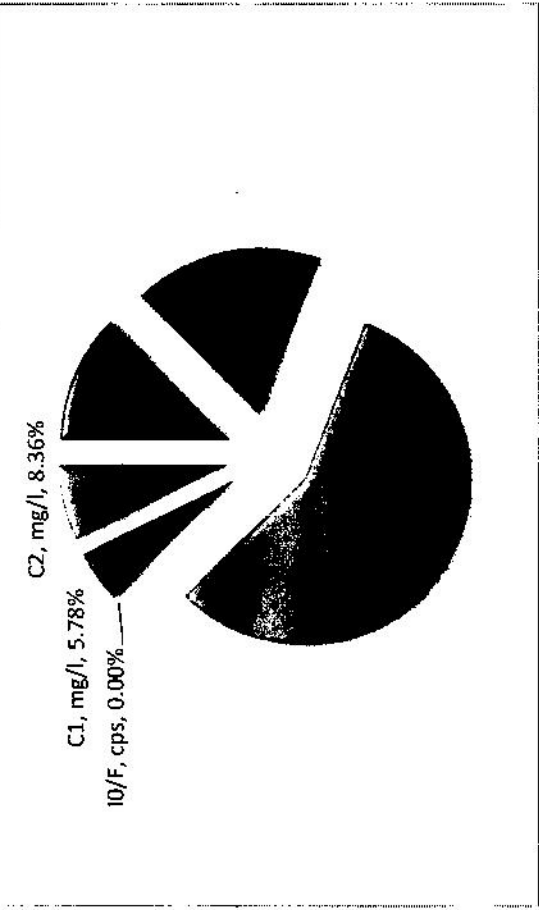
I_2 = интензитета на стандарта с висока концентрация, cps

F = отношението м/у концентрациите на естрахираната проба и изследваната

C_1 = концентрацията на стандарт 1, mg/ml

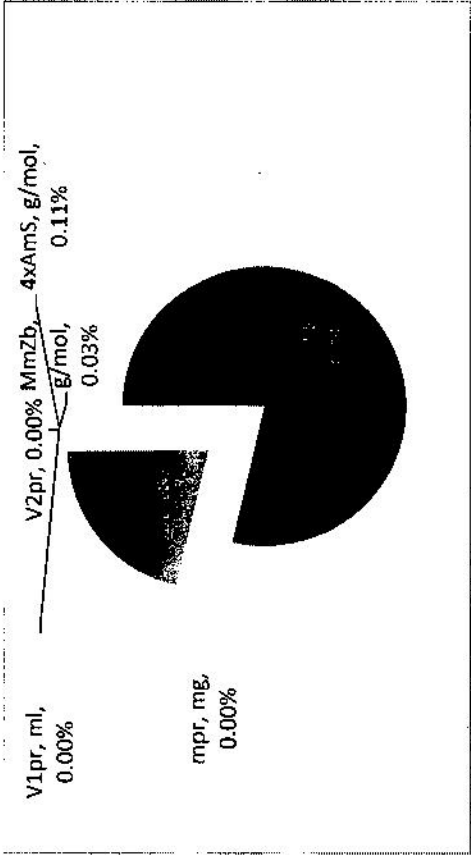
C_2 = концентрацията на стандарт 2, mg/ml

ТИП	X	X-average	u s	u s r	I1, cps	I2, cps	Iz, cps	Io/F, cps	C1, mg/l	C2, mg/l
A	I1, cps	41052	128	0,31%	41180	41052	41052	41052	41052	41052
A	I2, cps	51398	165	0,32%	51398	51398	51398	51398	51398	51398
A	Iz, cps	46161	141	0,30%	46161	46161	46161	46161	46161	46161
A	Io/F, cps	36,36	0,23	0,63%	36,36	36,36	36,36	36,36	36,36	36,36
B	C1, mg/l	160	0,32	0,20%	160	160	160	160	160,32	160
B	C2, mg/l	200	0,40	0,20%	200	200	200	200	200	200
Cz(q)=			179,61		179,36	179,30	180,16	179,61	179,77	179,81
U+-			1,44		0,72	0,40%				
k=2					Sum(qi-q)2	(qi-q)2				
					0,52	(qi-q)2				
					Contribution					
					I1, cps	I2, cps	Iz, cps	Io/F, cps	C1, mg/l	C2, mg/l
					2,56E-01	0,308249	-0,5437158	0,000889183	-0,163106	-0,196118
					0,0655119	0,095017	0,29562684	7,90646E-07	0,0266036	0,038462
					14,24%	20,66%	64,27%	0,00%	5,78%	8,36%



Тип	X	X average	u_s	u_s, r %	Cz, mg/l	mpr, mg	Vpr, ml	m1pr, ml	m2pr	4xAmS, g/mol	MmZb, g/mol
A	Cz, mg/l	179,61	0,72	0,40		179,61	179,61	179,61	179,61	179,61	179,61
B	mpr, mg	200	0,00025	0,00	200		200	200	200	200	200
B	Vpr, l	0,25	0,00052	0,21	0,25	0,25		0,25	0,25	0,25	0,25
B	mpr, g	25	0,00025	0,00	25	25	25		25	25	25
B	m2pr, g	50	0,00025	0,00	50	50	50	50		50	50
B	4xAmS, g/mol	128,27	0,019	0,01	128,27	128,27	128,27	128,27	128,27		128,27
B	MmZb, g/mol	275,756	0,023	0,01	275,756	275,756	275,756	275,756	275,756	275,756	275,756
	A.I.(q)	96,53			96,92	96,53	96,73	96,53	96,53	96,52	96,54
	U±		Sum(qi-q')²	(qi-q')	-0,39	0,00	-0,20	0,00	0,00	0,01	-0,01
			(qi-q')²	(qi-q')²	0,15	0,00	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00
					Cz, mg/l	mpr, mg	Vpr, ml	V1pr, ml	V2pr	4xAmS, g/mol	MmZb, g/mol
					78,68%	0,00%	21,18%	0,00%	0,00%	0,11%	0,03%

Резултат: 96.53% ± 0.87%



Основен принос в неопределеността внася апаратурата. Приноса от неопределеността на моларната маса е незначителен и може да се пренебрегне.

Сравнението на получената комбинирана неопределеност на резултатите: 0.42% за ICP-OES метода и 0.79% за CIPAC 25 метода показва по-висока прецизност на инструменталния метод и го определя като подходяща алтернатива при определянето на активната субстанция цинеб.

2. Съставеният бюджет на неопределеност на създадения от нас нов ICP-OES метод за определяне на активна субстанция Цинеб на база измерване на свързаната в продукта сяра, показва основен принос на апаратурата – 64,27 %. Тоест, за да се достигне максимална точност е необходимо да се оптимизират условия на работа с апарата. Във тази връзка е работено в две направления:

Установяване на оптималното време за интегриране:

При доказани до момента най-добри параметри за прилагане на метода с ICP-OES iCAP 6000:

RF Power 1250

Aux gas flow 0,5 l/min

Neb gas flow 0,7 l/min

- пробовъвеждане с OneNeb пулверизатор в режим: стандарт-проба-стандарт
- скорост на перисталтичната помпа 30 rpm ($Q=1.2$ ml/min)
- аксиален режим на наблюдение при основните три линии на S -180.731 nm, 182.034 nm, 182.624 nm.

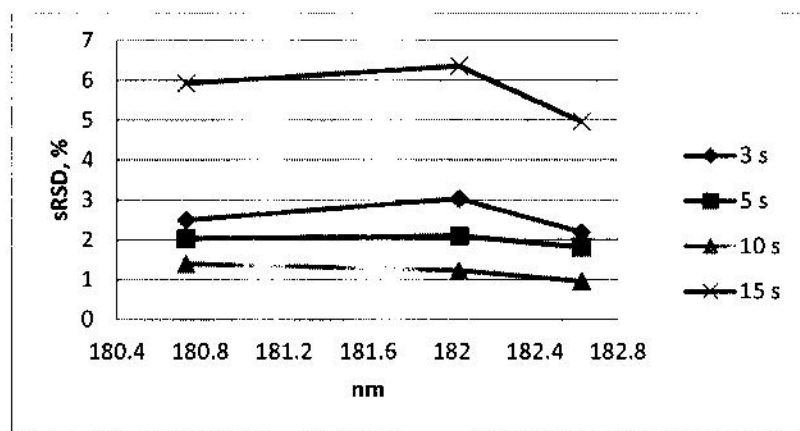
са извършени измервания на стандарти сяра с вариране на времето за интегриране от 3s, 5s, 10s и 15 s.

За целите на експеримента:

Разработени са три стандарта на сяра – 160 ppm, 180 ppm и 200 ppm. От изходен стандарт 1000 ppm на S са претеглени в три епруветки съответно 8g, 9g и 10 g. Към тези количества е добавен 3,75% разтвор на амоняк до 50 g.

Извършени са по шест измервания при горе посочените условия с вариране времето на интегриране.

Изчислени са сумарните относителни стандарти отклонения (sRSD%). Построена е графика, отразяваща връзката на sRSD и времето за интегриране при трите линии на S.



Най-ниски стойности на sRSD са получени при 10s време за интегриране при най-високата линия на сяра - 182.624 nm.

По-кратко или по-дълго задържане на пробата при условия на измерване в ултравиолетовата област води до влошаване на прецизността.

Изследване влиянието на вътрешен стандарт Бор върху точността на анализа.

За целите на експеримента:

Разработени са по три паралелни проби (за проверка точността на препаратната работа) от Цинеб, стандарт сяра 160 ppm и стандарт сяра 200 ppm.

0,2000 g Цинеб с концентрация 96.25% (определена по класическия CIPAC 25 метод) са разтворени в мерителна колба от 250 ml с 3.75% p-p на амоняк на ултразвукова вана. От разтвора са приготвени три проби при разреждане 1:1 (12,5 g проба до 25 g с 3.75% p-p на амоняк) - теоритично изчислено количество сяра – 175.5ppm.

Тегловно, по посочения в т.1 начин са приготвени и по 25g стандарти на сяра с концентрации 160 ppm и 200 ppm.

Към деветте проби е прибавен по 0.5g 200 ppm В, приготвен в 3.75% амонячен p-p.

! Концентрацията на вътрешния стандарт В е прецизирана спрямо интензитета на сярата.

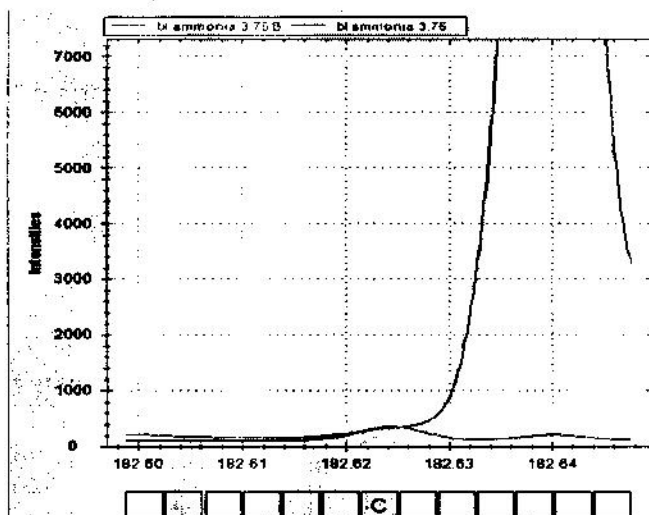
Същото количество В е прибавено и към 25 g празна проба.

За съпоставяне са приготвени и по една проба от трите вида, без прибавяне на В (прибавени са по 0.5 g от амонячния разтвор, за изравняване концентрацията на сярата) и една празна проба.

Измерванията са извършени при установените до момента оптимални условия за измерване на сяра, като към метода е добавено и измерването на елемента В при три от линиите му, близки до тези на S – 182.641 nm, 182.591 nm и 181.837 nm.

Изводи до момента:

- препараторната точност при добавянето на вътрешния стандарт, оказва влияние на резултата
- линия 182.641 nm на В е най-близка до установената от нас оптимална за измерване на сяра 182.624 nm и е най-подходяща за целта на нашето изследване след премахване на лява и дясна корекции на пиковите, необходимо поради близкото разположение на линиите
- сравнението на двете празни проби – без и с прибавен В, показва че стандарта В не съдържа S и е подходящ за изследването



Продължава обработката на резултатите по отношение на сравнение на прецизността и добива на пробите с и без вътрешен стандарт.

II. Други

1. Участвах в международен семинар на 20.05.2015г., организиран от ACM2, Thermo Fisher Scientific и Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“ на тема: Съвременни методи за химически анализ и контрол.

Представих постер:

Д. Чакърва-Димитрова, В. Кметов

„Оценяване на комбинираната неопределеност на резултатите при определяне на активна субстанция Цинеб, получени чрез CIPAC 25 метод и ICP-OES метод“

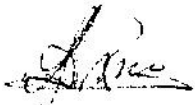
2. Заявих участие в 3-та Научна конференция за студенти и докторанти „ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА В ХИМИЯТА“, 11.2015г. с абстракт и презентация на тема „Оптимизиране на метод за индиректно определяне на активно вещество Цинеб чрез ICP-OES измерване на сяра“, което не можах да осъществя поради служебни ангажименти.

3. Подготвям статия по темата на докторантурата.

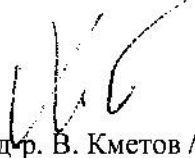
Препоръки:

Да продължи описанието на експерименталната работа и да се ускори изготвянето на публикации по дисертацията.

Докторант:


/ Диляна Димитрова /

Научен ръководител:


/ доц. д-р. В. Кметов /

Ръководител катедра АХКХ:


/ доц. д-р. В. Стефанова /

01.03.2016 г.

гр. Пловдив

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия” бе разгледано предложение за промяна в темата на дисертационния труд на задочен докторант **Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова**. Научният ръководител доц. д-р Веселин Кметов мотивира предложението. След обсъждане, катедреният съвет единодушно подкрепи темата на дисертационния труд на задочен докторант **Диляна Костадинова Чакърва-Димитрова** да бъде променен както следва от:

от: *„Развитие на аналитични методи за определяне на активни вещества в препарати за растителна защита“*

на: *„Разработване на метод за определяне на активното вещество в биоцида ЦИНЕБ чрез ICP-OES“*

Предлагаме на ФС на ХФ да утвърди предложената промяна.

Прилагам препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 9.03.2016.

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше предложена **промяна в темата на докторант Диляна Костадинова Чакърова-Димитрова**

от: „Развитие на аналитични методи за определяне на активни вещества в препарати за растителна защита“

на: „**Разработване на метод за определяне на активното вещество в биоцида ЦИНЕБ чрез ICP-OES**“

Предложението се обсъди и прие с 9 гласа „за“.

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия” бе разгледан отчетът на редовен докторант **Стефка Руменова Начкова** за първата година от докторантурата ѝ. Научният ръководител доц. д-р Пламен Пенчев запозна членовете на катедрата със становището си и предложи оценка за първата година на докторантурата **Отличен (6)**. След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научния ръководител бяха бе единодушно приети.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчета на **Стефка Руменова Начкова** с оценка **Отличен (6)**.

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 9.03.2016.
2. Отчет на докторант **Стефка Начкова** за изпълнение на индивидуалния план за първата година на докторантурата.

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 1.2 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Стефка Руменова Начкова за първата година от нейната докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 9 гласа "за". Изслушано беше становището на научния ръководител доц. Пламен Пенчев. Катедреният съвет обсъди и прие решението да ѝ се даде оценка Отличен (6).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС да приеме отчета на **Стефка Руменова Начкова** за първата година от докторантурата ѝ и да ѝ бъде дадена оценка **Отличен (6)**.

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/

До
Декана на Химически факултет
ПУ "Паисий Хилендарски"
гр. Пловдив

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

на
Стефка Руменова Начкова,
редовен докторант, катедра "Аналитична химия и Компютърна химия"
на Химически факултет

за периода 01.03.2015-01.03.2016 г.,
първа година от докторантурата

Тема на дисертационната работа: „Компютърни методи за интерпретация на ^{13}C -ЯМР спектри на природни съединения”.

Научен ръководител: доц. д-р Пламен Пенчев.

Изготвеният годишен отчет е съобразно план-програмата, предвидена за първата година от докторантурата.

I. Работа по дисертацията:

1. Квантовохимични методи

Запознах се с два софтуерни пакета за квантовохимични изчисления Gaussian 98 и Gamess. С помощта на научния ми ръководител направих изчисления за предсказване на ^{13}C и ^1H ЯМР спектри на съединението 4-(2-хидроксиетилимино)-(9'-флуорен)-спиро-5-(2-тиохидантоин), представени в приложения работен протокол. За две съединения от клас неоклеродани направих оптимизация на структурата с програмата Gaussian 98, необходимо условие за предсказване на ^{13}C и ^1H ЯМР спектрите им.

Направих изчисления за предсказване на ^{13}C и ЯМР спектри на три съединения – Scutaltisin B, Scutegalerin A и E, представени в приложените таблици. Всички пресмятания са направени с пакета за квантовохимични изчисления Gaussian в многоядрен режим, като част от предоставените за ползване ресурси, поддържани от екипа по проекта CART Lab. (<http://cart.uni-plovdiv.net>).

Оптимизацията на геометрията на структурата, както и ^1H и ^{13}C ЯМР изчисленията на спектрите са извършени при един и същи функционал и базис b3lyp/6-

31G(d). Отклоненията между измерените и предсказани стойности са оценени като средна абсолютна разлика CAP и стандартно отклонение на разликите COP за химичните отмествания на водородните и въглеродните атоми съответно.

Получените резултати са сравними с докладваните в литературата: ^{13}C CAP 3.29 ppm и COP 4.98 ppm [1]

съединение	^1H CAP, ppm	^1H COP, ppm	^{13}C CAP, ppm	^{13}C COP, ppm
Scutaltisin B	0.21	0.33	2.35	4.35
Scutegalerin A	0.28	0.69	4.31	3.84
Scutegalerin E	0.23	0.35	4.48	3.65

Оптимизирана е геометрията на платинов комплекс с органичен лиганд

2. Спектрални библиотеки

Предсказани са всички химични отмествания на въглеродните атоми за съединенията в библиотеката с модула ChemDrow Ultra 7.0 на пакета ChemOffice2002, работещ с адитивни схеми. Някои от резултатите с големи отклонения от измерените стойности са проверени с алтернативен метод HOSE библиотечно търсене достъпен от електронната страница на NMRshiftDB.

Направени са оценки на структурното и спектралното съдържание на коригираната библиотека, това включва:

- хистограми на разпределение на химичните отмествания в библиотектата за четирите мултиплетности;
- намерени са честотите на присъствие за различни функционални групи (структурите са представени във векторен вид с програмата PadelDescriptor).
- Изследвано е разнообразието на структури чрез сортиране по честота на поява на най-големите подструктури в библиотектата (подструктурите са намерени с програмата ScaffoldHopper). Резултатите са сравнени със структурното разнообразие за други библиотеки от природни съединения

Изследвана е приложението на логистична регресия за оценка на надеждността на подструктурите извлечени от интерпретационното търсене в библиотектата PHYCHEM. Резултатите показват сравнително ниска чувствителност 10%-13% за прагова надеждност 99%, за най-добрите модели, но висока степен на достоверност на предсказаната вероятност, т.е. неверни подструктури не се предсказват със вероятност по-висока от 98%.

Проучих работата на програмата CSEARCH за отнасяне на спектри, основаваща се на комбинирано използване на различни методи за предсказване на химичните отмествания на въглеродните атоми – адитивни схеми, невронни мрежи и библиотечно търсене с HOSE код.

3. Работа по текста на дисертацията

Работата по оформяне на литературния обзор не е завършена, но за момента са написани около 35 страници, описващи двата последни етапа на компютърните методи за разкриване на структурата с ^{13}C -ЯМР спектри – структурна генерация и предсказване на техните спектри с цел отсяване на най-вероятните от генерираните изомери. Първият етап, който се отнася до предсказване на структурни фрагменти е разгледан само в частта за системи базирани на правила, като остават да бъдат описани хеометричните методи и библиотечното търсене.

II. Учебна работа и педагогическа дейност:

1. Обучение:

Бях обучена да работя с два от апаратите за молекулна спектроскопия в катедрата - Инфрачервен спектрометър и UV-Vis спектрометър.

Посещение на специализирани курсове

- MODENA (Modeling Nanoparticle Toxicity) Training School, Plovdiv, Bulgaria, 20th to 22nd April 2015.
- Семинар на тема "Съвременни методи за химически анализ и контрол", организиран съвместно от ПУ"Паисий Хилендарски" и фирма ACM2, 20 май 2015 г.
- Лекция на Prof. Dr.Laszlo Peter, Wigner Research Center for Physics, Hungarian Academy of Science, на тема „Electrodeposition of various metals, magnetic materials and nanostructures“, 3 юни 2015 г.
- Лекция на д-р Иван Добринов, психиатър, на тема „Зависимостта като заболяване“ и „Дизайнерски дроги“, 26 февруари 2016 г.
- Лекция на проф. дхн Людмил Антонов, ИОХЦФ на БАН, на тема „От аналитичен проблем към молекулна електроника“ и „зелена аналитична химия в ИОХЦФ-перспективи и предизвикателства“, 18 февруари 2016 г.

2. Преподавателска дейност

За втори семестър на 2014/2015 учебна година

Провела съм часа упражнения със студенти I-ви курс Медицинска биология по "Аналитична химия и инструментални методи за анализ" и II-ри курс Медицинска химия, Инструментални методи за анализ.

За първи семестър на 2015/2016 учебна година

Провела съм 30 часа упражнения по „Аналитична химия и инструментални методи за анализ“ със специалност Екология на биотехнологичните производства I курс.

За втори семестър на 2015/2016 учебна година

До момента съм провела общо 15 часа упражнения по „Аналитична химия и инструментални методи за анализ“ със специалност Биология I курс и Спектрални методи за анализ със специалност Химия и биология III курс.

Провела съм и 10 часа упражнения по Молекулна спектроскопия с магистри.

3. Преподавателска дейност извън учебната програма

Бях ръководител на три разработки на студенти IV курс от специалности Химия и Химия с английски за получаване на европейска специална стипендия.

- „Изследване на активните групи на повърхността на биомаса от *Cryptococcus laurentii* AL₆₅ чрез FT-IR спектроскопия”
- „Потенциометрично титруване на биомаса от *Cryptococcus laurentii* AL₆₅”
- „Спектрални методи за изследване на адсорбционния потенциал на обработена биомаса от антарктически дрожди”

III. Участие в научни форуми

Rusinova-Videva S., Nachkova S., Mladenov R., Stoyanov P., “Biosorption Capacity of Treated Biomass of Antarctic Strain *Cryptococcus laurentii* AL₆₅”, Национална конференция за млади учени „Биологически науки за по-добро бъдеще”, Биологически факултет на ПУ”П. Хилендарски”, Пловдив, 30 – 31 октомври 2015г.

Dimitrov D., Adamov A., Rusinova-Videva S., Nachkova S., Active Sites For Metal Binding On Yeast Biomass By *Cryptococcus laurentii* AL₆₅, Третата научна конференция за студенти и докторанти “Предизвикателства в Химията”, Пловдив, 27- 28 ноември 2015г.

IV. Публикации

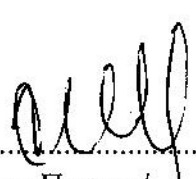
S. Nachkova, S. Milenkova, P. Penchev, P. Bozov; *Interpretive library search of plant compound spectra in a ¹³C NMR database*. Chemistry of Natural Compounds, **51** (5), 993-996 (2015).

Допълнителна работа

Взех участие в организацията на Третата научна конференция за студенти и докторанти “Предизвикателства в Химията”, проведена на 27- 28 ноември 2015г.

Докторант: 
/Стефка Начкова/

08.03.2016 г.

Научен ръководител: 
/доц. д-р Пламен Пенчев/

Ръководител катедра: 
/доц. д-р Виолета Стефанова/

СТ А Н О В И Щ Е

от доц. д-р Пламен Пенчев, ръководител на
Стефка Руменова Начкова, редовен докторант
към катедра „Аналитична химия и компютърна химия“
с тема: „Компютърни методи за интерпретация на ^{13}C -ЯМР спектри на природни
съединения“

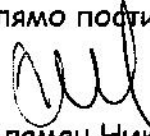
За отчетния период 2.3.2015 г. - 1.3.2016 г. докторант Начкова е изпълнила почти всички планирани дейности от нейния индивидуален работен план:

1. Извършени са изчисления за предсказване на ^{13}C - и ^1H -ЯМР спектри на три съединения - Scutaltisin B, Scutegalerin A и E, които заедно със спектралните данни ще бъдат използвани за написване на публикация.
2. Предсказани са всички химични отмествания на въглеродните атоми за съединенията в библиотеката с програмата ChemDraw Ultra 7.0 на пакета ChemOffice2002, работещ с адитивни схеми. Някои от резултатите с големи отклонения от измерените стойности са проверени с алтернативен метод - HOSE библиотечно търсене достъпен от електронната страница на NMRshiftDB.
3. Изследвано е приложението на логистична регресия за оценка на надеждността на подструктурите извлечени от интерпретационното търсене в библиотеката RNUCHEM.
4. Работата по оформяне на литературния обзор не е завършена напълно. Трябва да се спомене, че е написана значителна част от литературния обзор и докторантката се е запознала с всички публикации на други автори, близки до темата на дисертацията.
5. В този период е публикувана научна статия „S. Nachkova, S. Milenkova, P. Penchev, P. Bozov; *Interpretive library search of plant compound spectra in a ^{13}C NMR database*. Chem. Nat. Comp., 2015, **51**, 993-996.“ IF. 0.500.

Моята оценка за работа на докторант Стефка Начкова отлична. Като цяло съм изключително доволен от инициативността на г-ца Начкова и считам, че тя напълно разбира методите, които самостоятелно прилага. В хода на работата тя усвои програмния продукт R, което само по себе си е голямо постижение.

7.3.2016 г.

Научен ръководител:


/ доц. д-р Пламен Николов Пенчев /

До Декана
На Химически факултет
ПУ "П. Хилендарски"
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Стела Статкова
ръководител катедра Органична химия

Господин Декан,

Въз основа на решение на Катедрения съвет, състоял се на 09.03.2016г. (протокол № 264), предлагам на Факултетния съвет:

- да приеме отчета за работата на задочен докторант Светлана Любенова Аврамова с научни ръководители – доц. д-р Николай Кочев и доц. д-р Пламен Ангелов и тема: „Компютърно моделиране на химични реакции” през третата година на обучението
- да даде Отлична оценка за работата на докторанта за периода 01.03.2015 – 01.03.2016

Ръководител катедра:



(доц. д-р Стела Статкова)

10.03.2016г.

Пловдив

Препис-извлечение
от заседание на
катедра "Органична химия"
от 09.03.2016 г.

Протокол № 264

На 09.03.2016г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Органична химия"

Общ състав 9. Присъстват 9: доц. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Стела Статкова, доц. д-р Стоянка Николова, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Жан Петров, доц. д-р Солея Даньо, гл. ас. д-р Станимир Манолов, ас. Димитър Божилов

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси.
2. Текущи въпроси.

По т.1 от дневния ред бе разгледан отчета на задочен докторант Светлана Аврамова с научни ръководители доц. д-р Кочев и доц. д-р Пламен Ангелов за третата година от докторантурата с тема на дисертационния труд „Компютърно моделиране на химични реакции“. След коментар на научния ръководител и изказване на мнения на катедреният съвет, отчетът бе подложен на гласуване. Предложена бе отлична оценка за работата на докторанта през изминалата година от обучението.

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложения отчет за третата година от обучението на докторант Аврамова и предложената отлична оценка от научните ръководители за работата през третата година от обучението.

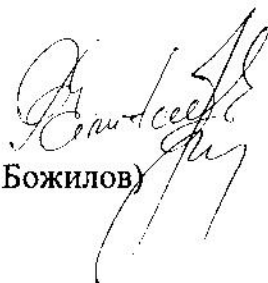
Решение: КС предлага на ФС:

1. Да приеме отчета за работата на задочен докторант Светлана Аврамова за третата година от обучението ѝ.
2. Да даде отлична оценка за работата на докторант Аврамова за изминалата година от обучението.

09.03.2016 г.
гр. Пловдив

Протоколчик:

(ас. Д. Божилов)

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'D. Bozhilov', is written over the printed name of the protocol chair.

МНЕНИЕ

за работата на **Светлана Любенова Аврамова**

задочен докторант при Химически факултет, катедра Органична химия

Период: **01.03.2015-01.03.2016**

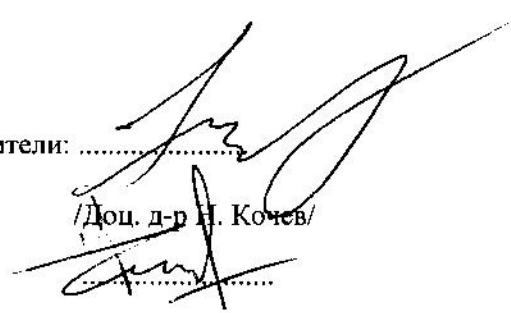
Докторант Светлана Аврамова успешно изпълни основните задачи от научно-изследователската дейност залегнали в индивидуалния план за третата година от работата по дисертацията. През изминалия период докторант Аврамова задълбочи своите компетенции в областта на приложението на методите на химическата информатика при моделиране на химически реакции. През третата година бе продължен анализът на софтуерни системи за моделиране на химични реакции и беше разширена литературната справка по дисертацията с акцент върху метаболитни реакции. Базата данни с химически реакции беше допълнена с 80 нови химични реакции представени като линейни нотации SMIRKS и нови правила за дефиниране на местата за протичане на реакция, дефинирани чрез линейната нотация SMARTS. Проведени бяха тестове на основния софтуерен модул за химични реакции Ambit-SMIRKS с две множества от химични съединения съдържащи съответно 612 и 547 съединения. През третата година беше реализиран работещ прототип на софтуерна система за моделиране на химични реакции - Ambit-Reactor. Светлана Аврамова проведе тестове на стратегии за изчерпателно прилагане на всички възможни трансформации върху дадена целева структура. Резултатите от тестовете са основа за разработването през следващата година на система за компютърно базиран ретросинтетичен анализ. Докторант Аврамова направи литературна справка и подготви предварителни текстове за публикуване на софтуерния модул Ambit-SMIRKS.

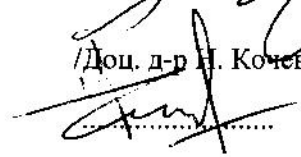
Въз основа на показаните резултати от третата година, препоръчваме катедрения съвет на катедра Органична химия да даде на докторант Светлана Аврамова оценка **Отличен (6)**.

07.03.2016 г.

гр. Пловдив

Научни ръководители:


/Доц. д-р Н. Кочев/


/Доц. д-р Пл. Ангелов/

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО, МЛАДЕЖТА И НАУКАТА

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ „ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ“

ОТЧЕТ

ЗА ИЗПЪЛНЕНИЕТО НА ИНДИВИДУАЛНИЯ УЧЕБЕН ПЛАН

на Светлана Любенова Аврамова,

задочен докторант при Химически факултет, катедра Органична химия

Дата на зачисляване в докторантура: **01.03.2013 г.**

Срок на завършване на докторантурата: **01.03.2017 г.**

Отчетен период: **01.03.2015 г. – 01.03.2016 г.**

Тема на дисертационния труд: **„Компютърно моделиране на химични реакции“**

Научни ръководители: **доц. д-р Николай Кочев, доц. д-р Пламен Ангелов**

Индивидуалният ми план на обучение, съобразен с Общия учебен план на докторска програма „Органична химия“, включва следните дейности за третата година:

1. Създаване на допълнителни бази данни и/или допълване на съществуващите бази данни
2. Тестване на софтуерния прототип и подобряване с нови модули и алгоритми
3. Реализация на официална работеща версия на софтуерната система за моделиране на химични реакции
4. Подготовка на глава от дисертационния труд
5. Участие в научни конференции
6. Публикуване на научни резултати

I. Създаване на допълнителни бази данни и/или допълване на съществуващите бази данни

Към експерименталната дейност по време на отчетния период бяха включени няколко задачи, касаещи работа по оценка на токсичността на веществата. Бе използвано софтуерното приложение със свободен достъп *Toxtree*, което класифицира веществата в няколко категории и предсказва техните токсични ефекти, базирайки се на молекулните им структури. Бе разгледан детайлно подхода за оценка на риска от въздействието на тези вещества, основаващ се на т. нар. праг на токсичност (ПТ) – количеството химично вещество, под който токсикологичният риск за човешкото здраве е незначителен.

Във връзка с групирането на химичните вещества според тяхната структура, експерименталната ми дейност по време на отчетния период включваше разбор на трите основни категории токсичност: ниска, средна и висока – т. нар. класове на Крамер (съответно I, II и III).

С оглед анализ по метода „дървото на решенията“ на Крамер 3 работихме по 29 въпроса (правила), съставени с налични знания по отношение на вещества с известна токсичност.

Прилагането на такъв анализ изискваше систематизиране на данни за:

- Структурните свойства на веществата (описани чрез линейни нотации SMARTS)
- Метаболитните пътища (трансформация или разграждане) на веществата в организма (описани чрез линейни нотации SMIRKS).

Допълването на дисертацията с метаболитни трансформации се счита за необходимо, тъй като по време на изготвянето на литературната справка се оказа, че към момента същите са актуални и представляват интерес от химична и най-вече от фармацевтична гледна точка – с оглед на факта, че може да се предскаже дали ще повишат биоактивността на дадени съединения (основно ксенобиотици) или ще деактивират терапевтичните му свойства. По този начин съединение с ниска бионаличност, дължаща

се на бърз метаболизъм, може да бъде модифицирано така, че нежеланите му метаболитни трансформации да се избегнат.

За целта бяха разгледани множество метаболитни реакции, категоризирани в два основни дяла: фаза I и фаза II на метаболизма.

Трансформациите, относими към фаза I (окисление, редукция, хидролиза), са такива, при които съединението се „функционализира“ – присъединяват се нови функционални групи, повишава се полярността на наличните или се снемат защитни групи, ако има такива.

При фаза II функционалните групи на съединението или неговия метаболит от фаза I се свързват с полярни ендogenous молекули като глюкоронова киселина или глутатион, при което се повишава хидрофилността на съединението и неговото отделяне от организма.

От своя страна биотрансформациите от фаза I бяха разгледани поетапно, като се обърна внимание основно на такива, включващи ензими от семейството на цитохром P450 (CYP450) – изборът се основа на литературни данни, съгласно които при проучване на компанията Pfizer е установено, че през 2002 г. в САЩ 2/3 от всички предписани лекарства са такива, в чиито метаболитни пътища са включени CYP450 ензими.

В модула AMBIT-SMIRKS първоначално фигурираха основни реакции, катализирани от ензими CYP450 (хидроксилране (алифатно и ароматно), O-деалкилиране, епоксидиране, хидроксилране на амини, N-окисление, окисление на алкохоли, N-деалкилиране, S-окисление, окисление на алдехиди). По време на отчетния период към вече съществуващите бяха добавени още 80 броя реакции (от фаза I и от фаза II), описани като линейни нотации SMIRKS.

Базата данни бе допълнена с тези трансформации, тъй като при литературната справка и при прегледа на бази данни с реакции със свободен достъп се установи, че това са най-често срещаните реакции. След като същите бяха представени като линейни нотации SMIRKS, бяха систематизирани в конфигурационен файл, който да може да бъде обновяван и допълван с нови трансформации.

При описването на метаболитните трансформации от съществено значение бе дефинирането чрез линейни нотации SMARTS на структурни фрагменти от молекулите – местата, където ще протекат трансформациите. Бяха изготвени линейни нотации SMARTS за множество функционални групи, които впоследствие да се използват за идентифициране (в т. ч. *mapping*) на местата, на които е възможно да протекат метаболитни трансформации. Към момента се работи върху правила, чрез които да се приоритизира прилагането на дадена реакция, когато в молекулата има няколко места, на които могат да протекат различни реакции.

Изготвените трансформации бяха усъвършенствани поетапно, тъй като в първоначалния си вид не бяха селективни по отношение на мястото на протичане на реакциите – така например реакция „хидролиза“ беше разработена като няколко отделни реакции – хидролиза на естери, ортоестери, тиоестери, амиди, лактони, ацетали, кетали, хемиацетали и хемикетали. Към момента продължава дефинирането на останалите избрани реакции.

По време на отчетния период не са правени промени по първоначалния дизайн на базата с данни с правила за моделиране на химични реакции по отношение на включените основни полета, представляващи характеристики, описващи една химична реакция, в т.ч. данни за реактант, реагент, продукт, вид на реакцията, реактивоспособност на компонентите, селективност, механизъм на протичане на реакцията, описание, условия, катализатори, разтворители, субстрати и др. Същите продължават да се описват приоритетно.

II. Тестване на софтуерния прототип и подобряване с нови модули и алгоритми

Изготвените като линейни нотации SMIRKS трансформации бяха тествани в модула AMBIT-SMIRKS със съединения от публикация на Munro. Токсичността на тези съединения е известна, така че освен тестване на новите трансформации, с Toxtree паралелно бяха тествани и гореспоменатите 29 въпроса (правила), използвани за анализ по метода „дървото на решенията“ на Крамер 3.

Изготвените като линейни нотации SMIRKS метаболитни биотрансформации (в т.ч. трансформациите, протичащи при следните метаболитни пътища: (1) хидролиза; (2) гликолиза; (3) Цикъл на Кребс; (4) разграждане на аминокиселини; (5) метаболизъм на мазнини) бяха тествани с 547 броя съединения, налични в храната или в организма, и оценени от експерти в Крамер 2.

Бяха тествани основните режими, в които работи AMBIT-SMIRKS когато трансформациите могат да бъдат приложени на няколко места в молекулата – тогава може намерените подструктури (1) да не се припокриват; (2) да не са идентични; (3) да не са хомоморфни; (4) да са в режим, при който се избира само един структурен мотив; (5) да са в режим, специфициран и зададен от потребителя.

III. Реализация на работеща версия на софтуерната система за моделиране на химични реакции

Разработен бе софтуерен прототип на приложението Ambit-Reactor, който реализира виртуален химически реактор. За дадено множество от начални реактанти, Ambit-Reactor прилага изчерпателно всички възможни реакции от предварително зададена база данни с трансформации. За всеки от получените продукти отново се прилагат всички

възможни трансформации, като се получават други нови продукти и т.н. Процесът на прилагане на виртуалните реакции продължава до достигане на предварително зададени условия, например брой приложени реакции, достигане на позволен продукт, достигане на забранен продукт т.н.

Работата на реактора се конфигурира с множество химически и логически условия наречени „стратегия на реактора“. Също така стратегията на реактора включва базата данни с химически реакции, множеството позволени продукти, множество забранени продукти и др.

Формално условията се задават чрез логически изрази за стойностите на дескриптори, изчислени за химическите обекти, участващи в реакциите.

Софтуерното приложение *Ambit-Reactor* може да бъде използвано и за ретросинтезен анализ, като за множество позволени продукти се зададат съединенията от база данни със стартови материали (реактанти).

IV. Подготовка на глава от дисертационния труд

Във връзка с направения до момента литературен обзор и подбраните значителен брой статии на специалисти, утвърдени в областта на органичната химия и планирането на органични синтези с помощта на компютърни методи (експертни системи), по време на отчетния период продължи класифицирането на избрани и нови статии, които да се дооформят като литературна справка за публикация по тематичното направление на дисертацията.

Към момента е направен анализ на основните софтуерни системи за моделиране на химични реакции, включени в литературната справка. Продължава работата върху изучаване на алгоритмите на избрани системи за моделиране на реакции в синтетично (*Reactor (ChemAxon)*) и ретросинтетично направление (*Route Designer*), които се характеризират с по-комплексни правила за протичане на реакциите и метаправила за тяхното управление.

Тенденциозният публичен интерес към системи за предсказване на метаболити и съответстващата им токсичност стана причина литературният обзор да се допълни, като обхватът бе разширен с биотрансформации. За целта към момента към справката са включени *enviPath* (база данни и система за предсказване на биотрансформации), *Rhea* (база данни с биохимични реакции) и *MetaPrint2D-React* (система за предсказване на метаболитни трансформации). Работата по допълване на литературния обзор с публикации, касаещи метаболизъм, продължава и към момента.

Подготвените текстове се оформят като глава от дисертационния труд.

V. Участие в научни конференции

През м. април 2015 г. посетих курс на обучение, спонсорирано от европейската програма COST (Modena training school). По време на курса бяха разгледани следните основни теми:

- охарактеризиране на наночастици по различни показатели;
- съществуващи модели за предсказване на токсичност и екотоксичност;
- модели за предсказване на потенциална токсичност на наноматериали.

Участниците в курса имаха възможност да приложат различните модели по време на предвидената практическата сесия, като използват платформата KNIME.

За целта, преди провеждане на Modena training school, посетих лекция на тема: „Въведение в KNIME“, в която освен запознаването на участниците със софтуерната платформа KNIME, включваше практическо занятие.

За периода март 2015 г. – март 2016 г., по отношение на предвиденото в индивидуалния ми план участие в научни конференции, сметохме, че може да бъде отложено за кратък срок, с оглед на факта, че експерименталната работа, приключена до момента, вече е представяна на научни конференции и на този етап би било целесъобразно данните да се систематизират и да се приоритизира работата върху научна публикация.

VI. Публикуване на научни резултати

Актуалността на тематиката на докторантурата и непрекъснатото обновяване и усъвършенстване на съществуващите системи за моделиране на химични реакции предполага по-задълбочен анализ на получените експерименталните данни, за да могат същите да бъдат сравнени спрямо публикувани вече такива. Работата по литературния обзор, необходим за изготвянето на статия, към момента се финализира и в кратки срокове предстои публикуването на модула AMBIT-SMIRKS.

09.03.2016 г.

гр. Пловдив

Докторант:

/Светлана Аврамова/

Научни ръководители:

/Доц. д-р Н. Кочев/

/Доц. д-р Пл. Ангелов/

До Декана
На Химически факултет
ПУ "П. Хилендарски"
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Стела Статкова
ръководител катедра Органична химия

Господин Декан,

Въз основа на решение на Катедрения съвет, състоял се на 09.03.2016г. (протокол № 264), предлагам на Факултетния съвет:

- да приеме отчета за работата на редовен докторант Йордан Иванов Стремски с научен ръководител – доц. д-р Стела Миронова Статкова и тема: „Синтез на бензотиазолови производни чрез мултикомпонентни реакции от Манихов тип” през първата година на обучението
- да даде Отлична оценка за работата на докторанта за периода 01.03.2015 – 01.03.2016

Ръководител катедра:
(доц. д-р Стела Статкова)

10.03.2016г.

Пловдив

Препис-извлечение
от заседание на
катедра "Органична химия"
от 09.03.2016 г.

Протокол № 264

На 09.03.2016г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Органична химия"

Общ състав 9. Присъстват 9: доц. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Стела Статкова, доц. д-р Стоянка Николова, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Жан Петров, доц. д-р Солея Даньо, гл. ас. д-р Станимир Манолов, ас. Димитър Божилов

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси.
2. Текущи въпроси.

По т.1 от дневния ред бе разгледан отчета на редовен докторант Йордан Стремски с научен ръководител доц. д-р Стела Статкова за първата година от докторантурата с тема на дисертационния труд „Синтез на бензотиазолови производни чрез мултикомпонентни реакции от Манихов тип”. Научният ръководител изложи своето мнение за докторанта и предложи отлична оценка за извършената работа през първата година.

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложения отчет за първата година от обучението на докторант Стремски и предложената отлична оценка от научния ръководител за работата през първата година от обучението.

Решение: КС предлага на ФС:

1. Да приеме отчета за работата на докторант Йордан Стремски за първата година от обучението му.
2. Да даде отлична оценка за работата на докторант Стремски за изминалата година от обучението.

09. 03. 2016 г.
гр. Пловдив

Протоколчик:

(ас. Д. Божилов)



Мнение

От доц. д-р Стела Статкова
Научен ръководители

Относно извършената работа от Йордан Иванов Стремски,
редовен докторант при Химически факултет, катедра Органична химия
за периода 01. 03. 2015 г. – 01. 03. 2016 г. (първа година)

По дисертация на тема: "Синтез на бензотиазолови производни чрез
мултикомпонентни реакции от Манихов тип"

I. Учебна работа и педагогическа дейност

Извършената учебна работа през 2015/2016 година от докторанта обхваща:

- Ръководство на лабораторни упражнения по дисциплината Органична химия (първа и втора част) на студенти от специалност Медицинска химия – общо 180 часа.
- Поемание на поредица специализирани лекции
- Участие в семинар по Органичен синтез
- Подготовка и полагане на изпит по специалността

II. Участие в конференции и публикации

Резултатите от работата по дисертацията са представени с две постерни участия и един доклад на три научни конференции – СУБ – Пловдив, АСМ 2, ПУ.

III. Работа над дисертацията

Работата по дисертацията показва:

- Събиране и обобщение на литературни данни върху: приложението на мултикомпонентни реакции за синтез на хетероциклени съединения; методи за синтез на 2-заместени бензотиазолови съединения; биологична активност на бензотиазолови съединения;
- Синтез на бензотиазолови производни на камалексин, намиране на оптимални условия за получаване на максимални добиви;
- Изолиране на съединенията, чрез препаративна колонна хроматография;
- Спектрално характеризиране на синтезираните вещества;
- Изследване на антимикробната активност на новосинтезираните вещества и анализ на резултатите;

Въз основа на показаните резултати, предлагам на катедрения съвет да даде Отлична оценка за цялостната работа на докторанта Йордан Стремски през първата година на обучението.

09.03.2016

Пловдив

Ръководител:



Доц. д-р Стела Статкова:



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ „ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”
ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

ОТЧЕТ

от *Йордан Иванов Стремски*

редовен докторант при Химически факултет, катедра Органична химия
за периода 01.03.2015 – 01.03.2016

I. Учебна работа и педагогическа дейност

1. Подготовка и полагане на изпит по специалността

На 15.02.2016 положих успешно изпита по научна специалност 01.05.03 Органична химия, заложен в индивидуалния ми план, утвърден от ФС с протокол № 169 от 17.03.2015 год., с оценка: Много добър 5.

2. В продължение на три семестъра, водих лабораторни упражнения по дисциплината Органична химия (първа и втора част), на студенти от специалности „Медицинска химия” и „Химия с маркетинг“ - (ОКС бакалавър, втори курс), редовно обучение - общо 160 часа.

3. От началото на втори семестър на учебната 2014/2015 година, до края на първи семестър на учебната 2015/2016 година, веднъж седмично посещавах Семинар за студенти и докторанти, по Стереоселективен органичен синтез, организиран от катедра ”Органична химия” при Химически факултет, под ръководството на доц. д-р Пламен Ангелов.

4. 01.05.2015г. Посетих интензивен курс лекции по програма Еразъм, с лектор професор Francisco Alonso Valdés, University of Alicante, Spain, на тема: „Organic stereochemistry” - 8 часа.

5. 22.05.2015г. Посетих интензивен курс лекции с лектор професор Gregory R. Cook, North Dakota State University, USA, на тема: „A new paradigm for indium-mediated allylation” - 2 часа.

6. 09.10.2015г. Посетих интензивен курс лекции с лектор професор д-р Vefa Ahsen, Chemistry Department, Gebze Technical University (Turkey), на тема: „*Synthesis of N4 ligands (Oximes and Phthalocyanines) and their applications as chemical sensors. From the molecule to the device*” - 2 часа.

7. 18.02.2016г. Посетих интензивен курс лекции с лектор професор д-р Людмил М. Антонов, от ИОЦХФ на БАН, гр. София, на теми: „*Тавтомерия. От аналитичен проблем към молекулна електроника*” и „*Зелена Аналитична химия в ИОЦХФ – перспективи и предизвикателства*” - 2 часа.

8. 26.02.2016г. Посетих интензивен курс лекции с лектор д-р Иван Добринов, психиатър в Държавната психиатрична болница "Д-р Георги Кисъв", гр. Раднево, на теми: „*Зависимостта като заболяване*” и „*Дизайнерските дроги*” - 2 часа.

II. Участие в семинари и конференции

1. 20.05.2015г. Участие в семинар организиран от фирма ACM2, Thermo Fisher Scientific и Химическия факултет на Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски” с постер на тема: „*Three-component Mannich-type reactions for synthesis of Camalexin's analogs*“, **S. Statkova-Abeghe, Y. Stremski, M. Naydenov, D. Bozhilov**

2. 11-13.06.2015г. Участие в VI-та Международна научна конференция на младите учени, организирана от Съюз на българските учени – гр. Пловдив с постер на тема: „*Multicomponent reactions for synthesis of new benzothiazole derivatives with antibacterial activity*“, **Y. Stremski, S. Statkova-Abeghe, V. Gacheva**

3. 27-28.11.2015г. Участие в трета научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията", организирана от Химическия факултет на Пловдивски университет „Паисий Хилендарски” гр. Пловдив с доклад на тема: „*Синтез на бис-хетероциклични производни чрез мултикомпонентни реакции*“, **Стремски Й., Сали А., Сали Ш., Статкова-Абегхе Ст.**

4. 27-28.11.2015г. Участие в трета научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията", организирана от Химическия факултет на Пловдивски университет „Паисий Хилендарски” гр. Пловдив с

постер на тема: „Приложение на мултикомпонентни реакции за синтез на 2-индолилимидазолини“, Стремски Й., Киркова Д., Статкова-Абегхе Ст.

III. Работа над дисертацията

1. Бе направен преглед на научната периодика по темата: „Синтез и биологична активност на нови бензотиазолови производни“. За целта бяха разгледани и преведени статии по научната тематика, открити, използвайки бази данни, лицензирани от Министерството на образованието: Science Direct, Scopus, Reaxys, Thieme и др. Разработването на методи за получаване на нови бензотиазолови производни предизвиква голям интерес, поради разнообразната биологична активност, която проявяват.

2. Някои индолови фитоалексини показват антипролиферативна / противоракова активност. В тази връзка бяха проведени изследвания за разработване на нов метод за синтез на аналози на фитоалексина Camalexin и негови производни, какъвто е Benzocamalexin, прилагайки трикомпонентна реакция на алфа-амидоалкилиране от Манихов тип, използвайки бензотиазол, киселинни хлориди и индол, като нуклеофилен реагент. Получени са нова серия производни (пет нови съединения), използвайки различен набор от киселинни хлориди. В кисела среда съединенията са нестабилни и водят до получаването на нов продукт, охарактеризиран чрез мас-спектрометрия, инфрачервена спектроскопия и температура на топене като трииндолил метан.

Резултатите от проведените изследвания са докладвани с постерно участие в семинар организиран от фирма ACM2, Thermo Fisher Scientific и Химическия факултет на Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“, 20 май 2015 година.

3. Indanone и Dimedone са част от групата на цикличните кетони. Голяма част от производните им са важен клас съединения, представляващи интерес поради тяхната разнообразна структура и биологична активност. В научната литература са цитирани примери за производни с висока антибактериална активност. Във връзка с по-ранни, успешно проведени мултикомпонентни синтези в катедрата по Органична химия на ПУ „П. Хилендарски“, бяха приложени реакции от такъв тип между бензотиазол, алкилхлороформиати и циклични кетони, за синтез на нови бензотиазолови производни и изследване на

тяхната антимикробна активност. След изолиране и хроматографско пречистване на петте новосинтезирани бензотиазолови производни е изследвана тяхната антибактериалната активност.

Резултатите от проведените изследвания са докладвани с постерно участие в VI-та Международна научна конференция на младите учени, организирана от Съюз на българските учени – гр. Пловдив, проведена от 11-13 юни 2015г.

4. В по-ранни, успешно проведени мултикомпонентни синтези в катедрата по Органична химия на ПУ „П. Хилендарски”, с участието на бензотиазол, ацилхлориди и различни нуклеофилни реагенти, бе установена зависимост на скоростта на реакциите на алфа-амидоалкилиране от вида на нуклеофила и ацилхлорида. В тази връзка бе осъществено сравнително изследване на реактивоспособността на бензотиазол и имидазол в мултикомпонентни реакции за синтез на нови бис-хетероциклични производни, съдържащи пиролов пръстен.

При проведените от нас мултикомпонентни реакции на амидоалкилиране с участие на бензотиазол (Схема 3) установихме, че реакциите протичат успешно с добри добиви, при температура 0 °C, за време от 1,5 часа, до получаването на две нови съединения. В хода на реакцията хроматографски се наблюдава получаването на ново дизаместено съединение, чиято структура е спектрално охарактеризирана, използвайки мас-спектрометрия.

С цел сравнително изследване на реактивоспособността на хетероцикличния реагент, реакцията бе проведена при използването на имидазол. След протичане на реакциите при еднакви условия (0 °C за 1,5 часа), е установено получаването на два нови продукта със значително по-висок добив. При тези условия, с използването на имидазол като нуклеофилен реагент, не бе установено получаването на дизаместен продукт.

Резултатите от проведените изследвания са съобщени с доклад в третата научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията", организирана от Химическия факултет на Пловдивски университет „Паисий Хилендарски” гр. Пловдив, проведена от 27-28 ноември 2015 г.

5. Всички новосинтезирани съединения са изолирани и спектрално характеризирани. Температурите на топене са определени на апарат Boetius PNMK05 без корекция. ¹H-ЯМР- и ¹³C-ЯМР-спектрите са снети с Bruker Avance

AV 600, DRX 300 като за разтворители са използвани CDCl_3 и MeOD. IR-спектрите са снети на Perkin Elmer 1750 Furie Transform спектрометър. мас-спектри са снети на Thermo Scientific™ Q Exactive™ Orbitrap™.

Забележка: Спектралните данни на всички новосинтезирани съединения по темата са на разположение в катедра ОХ.

09.03.2016

гр. Пловдив

Докторант:

/Йордан Стремски/

Научен ръководител:.....

/доц. д-р Стела Статкова-Абегхе/

До Декана
На Химически факултет
ПУ "П. Хилендарски"
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Стела Статкова
ръководител катедра Органична химия

Господин Декан,

Въз основа на решение на Катедрения съвет, състоял се на 09.03.2016г. (протокол № 264), предлагам на Факултетния съвет:

- да приеме отчета за работата на редовен докторант Мария Пламенова Пенкова с научен ръководител – доц. д-р Стоянка Николова Атанасова и тема: „Асиметричен синтез на N-съдържащи хетероцикли, съдържащи един хетероатом” през първата година на обучението
- да даде Отлична оценка за работата на докторанта за периода 01.03.2015 – 01.03.2016

Ръководител катедра: 

(доц. д-р Стела Статкова)

10.03.2016г.

Пловдив

Препис-извлечение
от заседание на
катедра "Органична химия"
от 09.03.2016 г.

Протокол № 264

На 09.03.2016г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Органична химия"

Общ състав 9. Присъстват 9: доц. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Стела Статкова, доц. д-р Стоянка Николова, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Жан Петров, доц. д-р Солея Даньо, гл. ас. д-р Станислав Манолов, ас. Димитър Божилов

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси.
2. Текущи въпроси.

По т.1 от дневния ред бе разгледан отчета на редовен докторант Мария Пенкова с научен ръководител доц. д-р Стоянка Атанасова за първата година от докторантурата с тема на дисертационния труд „Асиметричен синтез на N-съдържащи хетероцикли, съдържащи един хетероатом". Научният ръководител изложи своето мнение за докторанта и предложи отлична оценка за извършената работа през първата година.

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложения отчет за първата година от обучението на докторант Пенкова и предложената отлична оценка от научния ръководител за работата през първата година от обучението.

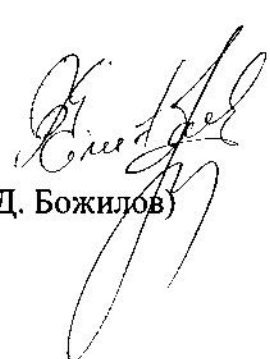
Решение: КС предлага на ФС:

1. Да приеме отчета за работата на докторант Мария Пенкова за първата година от обучението ѝ.
2. Да даде отлична оценка за работата на докторант Пенкова за изминалата година от обучението.

09. 03. 2016 г.
гр. Пловдив

Протоколчик:

(ас. Д. Божилов)



Мнение

от доц. д-р С. Николова,
относно дейността на Мария Пламенова Пенкова,
редовен докторант към катедра Органична химия

През първата година от редовната си докторантура, Мария Пенкова, е изпълнила задачите, предвидени в индивидуалния план, а именно:

1. Работа по дисертационния труд:

- Извършено е литературно проучване и систематизиране на източниците за синтеза на N-съдържащи хетероциклени съединения с един хетероатом.
- Описани и систематизирани са предхождащите изследвания в областта на асиметричния синтез. Започнато е оформянето на литературен обзор по темата на дисертацията.
- Въз основа на съществуващите методи е избран подходящ метод за провеждане на асиметричния синтез.
- Проучени са възможностите за получаване на подходящи заместени изходни съединения, изолирането и пречистването им и спектрална характеристика на получените съединения
- Част от резултатите са докладвани на Третата научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията".
- Успешно е положен изпит по специалността, заложен в индивидуалния план на 15.02.2016г.

2. Посещение на специализирани курсове

Във връзка с индивидуалния план на докторанта са посетени 7 лекции, интензивни курсове или обучения.

3. Педагогическа дейност

През изтеклия период докторантката е провела упражнения по Клинична химия на студенти от специалност "Медицинска химия", трети курс, редовна форма на обучение.

В заключение, всички задачи включени в индивидуалния са изпълнени в срок. Във връзка с това, предлагам да се даде отлична оценка на редовен докторант Мария Пламенова Пенкова.

09.03.2016

Пловдив

Научен ръководител:



(доц. д-р С. Николова)



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ „ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”

ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

на *Мария Пламенова Пенкова*,

редовен докторант в катедра Органична химия, Химически факултет
за периода 01.03.2015 – 01.03.2016г.

Тема на дисертационен труд:

"Асиметричен синтез на N-съдържащи хетероцикли, съдържащи един
хетероатом"

I. Учебна работа и педагогическа дейност

1. Посещение на интензивен курс лекции на тема: *"Organic stereochemistry"* с лектор Prof. Dr. Francisco Alonso Valdes, проведени на 18.05.2015г.
2. Посещение на семинар на тема: *"Съвременни методи за химически анализ и контрол"*, проведен от фирма ACM2, Thermo Fisher Scientific и Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски” на 20.05.2015г.
3. Посещение на интензивен курс лекции на тема: *"A new paradigm for indium-mediated allylation"* с лектор Prof. Gregory R. Cook, Department of Chemistry and Biochemistry, North Dakota State University, проведен на 22.05.2015г.
4. Посещение на лекция на тема: *"Synthesis of N4 ligands (oximes and phthalocyanines) and their applications as chemical sensors from the molecule to the device"*, с лектор Professor Dr. Vefa Ahsen Chemistry Department, Gebze Technical University, Turkey проведено на 09.10.2015 г.

5. Участие в обучението за бази данни на издателство Elsevier, проведено на 2.11.2015 г. в ПУ.
6. Посещение на проведеното тържествено честване по повод 120 години от рождението на световно известния български учен в областта на органичната химия академик Димитър Иванов, проведено на 04.11.2015 г. Доклад за научните му приноси изнесе проф. дхн Владимир Димитров от Института по органична химия при БАН – София.
7. Посещение на лекция на теми: " Зависимостта като заболяване" и "Дизайнерските дроги", с лектор д-р Иван Добринов, проведено на 26.02.2016г.
8. Посещение на курс по английски език, организиран от Пловдивски университет „Паисий Хилендарски”.
9. Участие в организационният комитет на Третата научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията".
10. Участие с постер в Третата научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията".
11. Провеждане на упражнения по Клинична химия на студенти от специалност "Медицинска химия" трети курс, редовна форма на обучение.
12. Успешно положен изпит по специалността, заложен в индивидуалния план за обучение по докторска програма Органична химия към катедра Органична химия на Химически факултет. Изпитът бе проведен на 15.02.2016г.

II. Работа над дисертационен труд

1. Подготовка на литературен обзор по темата.

Започнах оформянето на литературен обзор по темата „Асиметричен синтез на N-съдържащи хетероцикли, съдържащи един хетероатом”. За целта бяха използвани базите данни, лицензирани от Министерството на

образованието: ISI Web of Knowledge, Science Direct, Scopus и др. Литературната справка показва, че асиметричният синтез е един от водещите методи за синтез, използван през последните години. Един от методите за получаване на хирална молекула е употребата на изходно съединение с асиметричен въглероден атом. Това ни насочи, към използването на природни аминокиселини, които след подходяща редукция приложихме могат да сключат първоначално тричленен азиридинов пръстен.

2. Експериментална работа.

2.1. Синтез на изходни съединения.

За изминалият период бяха синтезирани някои от изходните съединения. Изследвахме получаването на азиридинов пръстен от хирални β -аминоалкохоли и успешно приложихме нови синтетични методи за получаването им. Ключова стъпка беше провеждането на редукция на подходящи природни аминокиселини до съответните β -аминоалкохоли. Проведохме изследвания за получаването на нови азиридинови производни, представляващи интерес от гледна точка на тяхната биологична активност и по-нататъшното ми приложение в синтеза на нови N-съдържащи хетероциклени съединения.

Реакционните условия бяха оптимизирани с цел получаване на максимални добиви от целевите съединения, чрез възможно най-малък брой синтетични етапи и минимален разход на материали и енергия.

2.2. Спектрална характеристика на новосинтезирани съединения.

Всички получени нови съединения са характеризирани с техните IR-, ^1H - и ^{13}C -NMR-спектри, а на кристалните - и с техните температури на топене.

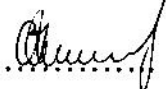
3. Част от резултатите от проведените изследвания бяха докладвани с постер на Третата научна конференция за студенти и докторанти "Предизвикателства в Химията".

03.2016г

гр. Пловдив

Докторант: 

/М. Пенкова /

Научен ръководител:..... 

/доц. д-р С. Николова/

До Декана
На Химически факултет
ПУ "П. Хилендарски"
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Стела Статкова
ръководител катедра Органична химия

Господин Декан,

Въз основа на решение на Катедрения съвет, състоял се на 09.03.2016г. (протокол № 264), предлагам на Факултетния съвет:

- да приеме отчета за работата на редовен докторант Павел Руменов Янев с научен ръководител – доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов и тема: „Синтез на –защитени аминок-β-кетоамиди и изследване на приложението им като прекурсори за пиролидинови, пиперидинови и тетрамови хетероциклени съединения” през първата година на обучението
- да даде Отлична оценка за работата на докторанта за периода 01.03.2015 – 01.03.2016.

Ръководител катедра: 

(доц. д-р Стела Статкова)

10.03.2016г.

Пловдив

Препис-извлечение
от заседание на
катедра "Органична химия"
от 09.03.2016 г.

Протокол № 264

На 09.03.2016г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Органична химия"

Общ състав 9. Присъстват 9: доц. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Стела Статкова, доц. д-р Стоянка Николова, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Жан Петров, доц. д-р Солея Даньо, гл. ас. д-р Станимир Манолов, ас. Димитър Божилов

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси.
2. Текущи въпроси.

По т.1 от дневния ред бе разгледан отчета на редовен докторант Павел Янев с научен ръководител доц. д-р Пламен Ангелов за първата година от докторантурата с тема на дисертационния труд „Синтез на защитени аминокетонамиди и изследване на приложението им като прекурсори за пиролидинови, пиперидинови и тетрамови хетероциклени съединения”. Научният ръководител изложи своето мнение за докторанта и предложи отлична оценка за извършената работа през първата година.

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложения отчет за първата година от обучението на докторант Янев и предложената отлична оценка от научния ръководител за работата през първата година от обучението.

Решение: КС предлага на ФС:

1. Да приеме отчета за работата на докторант Павел Янев за първата година от обучението му.
2. Да даде отлична оценка за работата на докторант Янев за изминалата година от обучението.

09.03.2016 г.
гр. Пловдив

Протоколчик:

(ас. Д. Божилов)



МНЕНИЕ

От доц. д-р Пламен Ангелов

Относно работата на докторант Павел Руменов Янев през първата година от редовна докторантура на тема „Синтез на N-защитени аминок-β-кетоамиди и изследване на приложението им като прекурсори за пиролидинови, пиперидинови и тетрамови хетероциклени съединения”

За отчетния период 01.03.2015 – 01.03.2016 г. докторантът е изпълнил всички дейности от индивидуалния си план, с изключение на полагането на изпит по специалността, който намерих за уместно да бъде преместен във втората година от докторантурата.

Докторантът изготви първата част от литературния обзор по дисертацията си и извърши значителен обем експериментална работа. Получени и спектрално охарактеризирани бяха много от планираните междинни съединения. Предстои да бъдат оптимизирани синтетичните процедури, както и да бъдат по-обстойно изследвани някои от неочакваните процеси, на които се натъкнахме в хода на работата. Срещаме затруднения с навременното и обстойно спектрално охарактеризиране на получаваните съединения, но това по никакъв начин не е по вина на докторанта.

Павел Янев бе включен и в преподавателската работа на катедрата, като през първия семестър изведе 65 часа упражнения по Органична химия със студенти от специалност Химия (3-ти курс, задочно), а през текущия семестър са му поверени упражнения по Органична химия със студенти от специалност Медицинска химия (2-ри курс).

Павел Янев посещава редовно катедрените семинари и се подготвя старателно за всеки от тях.

В заключение, нямам никакви забележки към работата на докторанта Павел Янев и предлагам да получи отлична оценка за първата година от редовната си докторантура.

09.03.2016 г.

Научен ръководител:

/ доц. д-р Пламен Ангелов /

До Декана на
Химически факултет
ПУ „Паисий Хилендарски“
Пловдив

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

на Павел Руменов Янев

редовен докторант към катедра Органична химия

за първата година от докторантурата (01.03.2015 – 01.03.2016 г.)

тема на дисертацията: „Синтез на N-защитени аминокиселини и изследване на приложението им като прекурсори за пирролидинови, пиперидинови и тетрамови хетероциклени съединения“

1. Работа с научна литература

Направена бе литературна справка върху 48 литературни източника.

2. Лабораторна работа

2.1. В двуетапен синтез бяха получени необходимите изходни бета-енаминоамиди.

2.2. Получен бе набор от азотно защитени аминокиселини, като използвахме 5 различни аминокиселини и 4 различни защитни групи (три карбаматни и трифлуороацетилна). Използвахме както оптически чисти, така и рацемични аминокиселини.

2.3. Карбоксилната група на киселините от предходната точка бе активирана по метода на смесените анхидриди и бе изследвано взаимодействието им с енаминоамидите от точка 2.1. В резултат на това в повечето случаи бяха успешно получени съответните въглеродно ацилирани бета-енаминоамиди.

2.4. Изследвани бяха реакциите на междинните съединения от точка 2.3. в трифлуорооцетна киселина и бе установено, че наред с очакваните кетоамиди се получават и странични продукти на циклизация.

2.5. Изследвано бе влиянието на условията върху конкурентните процеси и бяха намерени условия за преимуществено протичане както на единия, така и на другия процес.

3. Учебна и преподавателска работа

3.1. Ръководих 65 учебни часа лабораторни упражнения по Органична Химия със студенти от специалност Химия (задочно, 3-ти курс).

3.2. Посещавах и участвах в ежеседмичните семинари на катедра Органична химия

3.3. Посетих интензивен курс лекции на испанския професор Франциско Алонсо Валдес на тема „Органична стереохимия“

3.4. Посетих лекцията на американския професор Грегъри Кук на тема „Нова парадигма за индиево-медирано алилиране“

Пловдив

01.03.2016 г.

Научен ръководител:


/ доц. д-р Пламен Ангелов /

Докторант:


/ Павел Янев /

Ръководител катедра:


/ доц. д-р Стела Статкова-Абергхе /

До Декана на ХФ
при ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание от 9.03.2016 Катедреният съвет на КАХКХ се запозна с изготвения доклад за резултатите от изследователската работа на докторант **Веселина Христова Паскалева** по Област на висше образование - Природни науки, математика и информатика; Професионално направление - 4.2 Химически науки; Докторантска програма "Теоретична химия", с тема на дисертационния труд: **„Компютърно генериране на тавтомери на органични съединения и приложения в химичната информатика“**. Докладът обхваща периода от зачисляването на В.Паскалева като докторант на самостоятелна подготовка от 12.10.2015г. до настоящия момент. Научният ръководител на докторанта - доц. д-р Николай Тодоров Кочев, представи своето становище, в което заяви, че всички дейности, предвидени в индивидуалния план на докторанта са предсрочно завършени и предложи отлична оценка за работата на докторанта.

Катедреният съвет единодушно прие отчета на докторанта и оценката на научния ръководител.

Предлагам на ФС на ХФ да приеме окончателния отчет за предсрочно завършената работа по докторантурата на **Веселина Паскалева** с оценка **Отличен (6)**.

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 9.03.2016.
2. Отчет на докторант **Веселина Паскалева** за изпълнение на индивидуалния план.

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц. д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 2.1 от дневния ред беше обсъден и приет с 9 гласа „за” отчетът на **Веселина Христова Паскалева**, докторант на самостоятелна подготовка, за периода 12.10.2015 – 09.03.2016. По предложение на научния ръководител доц.д-р Николай Кочев беше гласувана оценка **Отличен (6)**.

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/

СТАНОВИЩЕ

Относно работата върху дисертационния труд на **Веселина Христова Паскалева**, докторант на самостоятелна форма на обучение към КАХКХ, на тема:
„Компютърно генериране на тавтомери на органични съединения и приложения в химичната информатика“

от доц. д-р Николай Кочев - научен ръководител на докторанта

Основните задачи, поставени в индивидуалния план на докторанта за първата, втората и третата година са изпълнени.

Веселина Паскалева успешно издържа изпитите по дисциплините от теоретичната подготовка, научно-методичната подготовка и факултативните дисциплини залегнали в индивидуалния план на докторанта. Също така успешно бе издържан изпитът по докторантския минимум. През текущата 2015/2016 академична година Паскалева има аудиторната заетост в бакалавърски програми 430 часа.

Завършена е научно-изследователската работа по дисертацията. Направена е подробна литературна справка, разучени са съществуващите софтуерни генератори и публикуваните алгоритми за генериране на тавтомери. Въз основа на литературната справка са оформени стратегиите за генериране на тавтомери.

Създадена е основна база данни с тавтомерни правила покриващи основните типове тавтомерия. Реализиран е класически комбинаторен подход за генериране на тавтомери. Въз основа на анализа от тестовите на комбинаторния подход са разработени два нови алгоритъма за изчерпателно генериране на тавтомерните форми на целева молекула: (1) подобрен комбинаторен подход и (2) алгоритъм за претърсване на дървото на решенията в дълбочина с „връщане назад“. Разработени са алгоритми за филтриране на получените тавтомери, както и алгоритми за тяхното ранкиране. Извършена е оптимизация на създадените алгоритми. Тестовите резултати показват, че разработените алгоритми са съпоставими с водещите програми за генериране на тавтомери от литературната справка, като в редица случаи разработеният подход в дисертацията показва по-добри резултати. Разработена е стратегия за оптимално автоматично генериране на тавтомери базирана на комбинация от разработените алгоритми. Изследвано е влиянието на тавтомерията при решаване на основни задачи в химичната информатика.

Алгоритъмът е програмно реализиран, като част от популярната система по химична информатика *Ambit*. Резултатите от дисертацията са използвани от компанията *Syngenta* при изследване и разработване на нови агро-химикали, както и в проекта *Escape* при нормализацията на няколко от най-популярните структурни бази данни, в това число най-голямата публична база данни в света *PubChem* съдържаща над 88 милиона съединения.

Работата по цялостното оформяне на дисертационния труд е завършена. Направен е подробен преглед на съвременното състояние на научните изследвания във всички аспекти, застъпени в темата на дисертационния труд. Обемът и тематичната насоченост на събраните литературни източници съответстват на изискванията за изчерпателност и актуалност на проследяването на научната периодика по проблематиката на дисертационния труд. Научно-изследователската работа е описана коректно и ясно. Дискусиите върху резултатите показват задълбочено познаване на методите на химичната информатика и принципите на научно-приложно моделиране чрез съчетаване на методи за структурно представяне, алгоритми за обработка на структурна топологична

информация, методи за индуктивно моделиране и използване на съвременен софтуер по химична информатика.

Резултатите от работата по дисертацията са публикувани в следните списания:

- 1) N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova, Automatic Generation of Tautomers, University of Plovdiv - Scientific Papers, 38 (5), **2011**, 65-70
- 2) Kochev, N. T., Paskaleva, V. H. and Jeliaskova, N. (**2013**), Ambit-Tautomer: An Open Source Tool for Tautomer Generation. Mol. Inf., 32: 481-504. doi: 10.1002/minf.201200133
- 3) N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova, Chemical Information Processing for QSAR/QSPR Modeling, Scientific Researches of the Union of Scientists in Bulgaria - Plovdiv, Series C. Natural Sciences and Humanities, vol. XVI, **2013**, 223-226

Досега са забелязани 7 цитирания на публикуваните материали.

Резултатите от проведените изследвания са представени като постери на редица престижни научни форуми в чужбина:

Quantitative Structure-Activity Relationships in Environmental and Health Sciences (QSAR2014) at the IRCCS - Istituto di Ricerche Farmacologiche "Mario Negri", Milan, Italy, June 16-20, 2014

OpenTox Euro 2013 at Johannes Gutenberg University of Mainz, Mainz, **Germany**, 30 September - 2 October 2013

6th Sheffield Conference on Chemoinformatics at Sheffield, **England**, 22-24 July 2013

19th EuroQSAR at Vienna, **Austria**, August 26-30, 2012

Считам, че докторант Паскалева вече притежава необходимите умения както за анализ на съвременното състояние на научните постижения, така и за планиране и провеждане на самостоятелно научно изследване.

През изминалата година Веселина Паскалева работи усърдно, задълбочено и ефективно, в резултат на което работата извършена от Веселина Паскалева напълно покрива дейностите, предвидени в индивидуалния план за първата, втората и третата година от докторантурата и безспорно заслужава оценка **Отличен (6)**.

Постигнатите резултати ми дават пълно основание да считам, че Веселина Паскалева има готовност за финализиране на работата по дисертационния труд и предлагам да бъде отчислена с право на защита.

научен ръководител:

доц. д-р Николай Кочев

08.03.2016

Пловдив



О Т Ч Е Т

за изпълнението на индивидуалния учебен план на

Веселина Христова Паскалева

докторант на *Самостоятелна подготовка*, към катедра *Аналитична химия и компютърна химия*, **ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ**, ПУ "П.Хилендарски"

Област на висше образование: *Природни науки, математика и информатика*
професионално направление: *4.2 Химически науки*
докторска програма: *Теоретична химия*

Зачислена в докторантура на основание Заповед № *P33-4643* от *12.10.2015* година, със срок на обучение в докторантурата *3 години*

Тема на дисертационния труд:

Компютърно генериране на тавтомери на органични съединения и приложения в химичната информатика

Научен ръководител:

доц. д-р. Николай Тодоров Кочев

Извършени дейности по точките от Индивидуалния план, планирани за период от 3 години считано от датата на зачисляване в докторантура 12.10.2015г.

- Проведени са изпитите по теоретична, научно-методическа подготовка, факултативните дисциплини и специалната подготовка (докторантски минимум) планирани в Индивидуалния план:
 - Компютърно представяне на химични обекти и третиране на химична информация – успешно издържан;
 - Новости в компютърните методи за молекулно моделиране – успешно издържан;
 - Методология на научното изследване, литературни източници и бази данни, работа с научна документация, оформяне на научни съобщения и доклади – успешно издържан;
 - Софтуерно програмиране в химията – успешно издържан;
 - Особенности в изследователската теория и практика по направлението на тематиката на дисертанта (докторантски минимум) – успешно издържан;
 - Софтуер с отворен код в химичната информатика – успешно издържан.
- Проведено е ръководство на лабораторни упражнения, оценяване и ръководство на курсови работи съобразно учебния план на катедрата.
- Извършени са научно-изследователски дейности по работата над дисертацията:
 - Направена е литературна справка по темата на дисертацията. Съставена е литературна библиотека от селектираните литературни източници в системата Mendeley;
 - Изготвен е литературният обзор по дисертационния труд. Описана е извършената работа по поставените задачи. Оформен е цялостният текст на дисертацията;
 - Разучени са генератори и алгоритми за генериране на тавтомери – като ChemAxon Marvin, Cactvs, InChI/CDK и други;
 - Съставена е основна база с тавтомерни правила, включваща правила описващи миграция на протон на разстояние 1-3;
 - Създаден е алгоритъм за генериране на тавтомери, базиран на класически комбинаторен подход (CM). Проведени са тестове с извадка от малки органични молекули. Резултатите от тестовете са анализирани, като по-обстойно са разгледани случаите, при които CM пропуска очаквани тавтомерни форми. В резултат на анализа са добавени допълнителни тавтомерни правила описващи миграция на протон на по-далечно разстояние (1-5 и 1-7). Създадени са TestCases (софтуерни тестове) за всяко от тавтомерните правила.
 - Разработени са два нови алгоритъма за генериране на тавтомерни форми – подобрен комбинаторен метод (CMI) и алгоритъм базиран на метода „търсене в дълбочина“ (IA-DFS).
 - Разработени са алгоритми и правила за филтриране на получените тавтомери: (1) Exclude Filter и Warning Filter – премахващи генерирани тавтомерни форми съдържащи аленови атоми в циклична и ациклична част; (2) алгоритми за премахване на дублиращи се структури – филтър базиран на

вътрешно тавтомерно номериране, филтър базиран на изоморфизъм, филтър базиран на линейна нотация InChI;

- Разработена е система за ранкиране на генерираните тавтомери базирана на емпирично изведени тегла. Системата намира приложение при намиране на канонична тавтомерна форма;
- Създадените алгоритми за генериране на тавтомери, ранкиращата система и филтрите бяха имплементирани в платформата за химична информатика Ambit. Написани са на Java под LGPL лиценз, като е използвана библиотеката за химична информатика CDK. Модулът за генериране на тавтомери може да бъде свален като command-line приложение от: <https://github.com/ideaconsult/examples-ambit/tree/master/tautomers-example>.
- Извършени са тестове на създадените алгоритми: сравняване на получените резултати с теоретично определени такива; сравняване на резултатите при приложение на 1-3, 1-5 и 1-7 правилата; тестове за еквивалентност на генерираните тавтомерни форми; сравняване на резултатите получени при прилагане на CMI и IA-DFS. Извършен е анализ на резултатите от направените тестове;
- Извършени са външни сравнителни тестове между създадените алгоритми за генериране на тавтомерни форми и водещи програми и алгоритми за генериране на тавтомери от литературната справка – Cactvs, Chem Axon Marvin, InChI/CDK и други: тестове за изчерпателно генериране на тавтомерни форми; сравнителни тестове на каноничните тавтомерни форми; тестове за бързодействие. Извършен е анализ на резултатите от направените тестове;
- Извършена е оптимизация на създадените алгоритми. Подобрено е бързодействието им. Избрани са оптимални начални параметри за command-line приложението;
- Създадена е нова ранкираща система. Теглата са изведени от голяма извадка от структури. Въведени са допълнителни корекционни фактори, описани в JSON файлов формат;
- Реализирана е стратегия за оптимално автоматично генериране на тавтомери базирана на комбинация от разработените алгоритми;
- Изследвано е влиянието на тавтомерията при решаване на основни задачи в химичната информатика: изчисляване на молекулни дескриптори и бит-вектори; прилагане и създаване на QSAR/QSPR модели. Изследвани са варианти за оптимално включване на тавтомерната информация в тези процеси;
- По темата на дисертацията са направени три публикации – 1 с импакт фактор (забелязани са 7 цитата до момента) и 2 в национални списания :
 - Kochev, N. T., Paskaleva, V. H. and Jeliazkova, N. (2013), Ambit-Tautomer: An Open Source Tool for Tautomer Generation. Mol. Inf., 32: 481–504. doi: 10.1002/minf.201200133
 - N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliazkova, Chemical Information Processing for QSAR/QSPR Modeling, Scientific Researches of the Union of Scientists in Bulgaria - Plovdiv, Series C. Natural Sciences and Humanities, vol. XVI, 2013, 223-226
 - N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliazkova, Automatic Generation of Tautomers, University of Plovdiv - Scientific Papers, 38 (5), 2011, 65-70

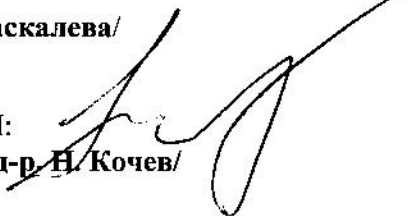
- Постерни участия на конференции – 4 в чужбина и 5 национални:
 - Vesselina Paskaleva, Nikolay Kochev, Ognyan Pukalov, Atanas Terziyski, Nina Jeliaskova, Ambit-Tautomer Ranking System: Analysis and optimization. Part I. Speed optimization of the tautomer generation process and filtering methods, VI Международна научна конференция на младите учени, СУБ-Пловдив 2015, June 11-13, 2015
 - Nikolay T. Kochev, Ognyan Pukalov, Vesselina H. Paskaleva, Nina Jeliaskova, Ambit-Tautomer - a software tool for exhaustive tautomer generation. Applications in QSAR/QSPR modeling, Quantitative Structure-Activity Relationships in Environmental and Health Sciences (QSAR2014) at the IRCCS - Istituto di Ricerche Farmacologiche "Mario Negri", Milan, Italy, June 16-20, 2014
 - V.Paskaleva, N.Kochev, O.Pukalov, N.Jeliaskova, Exploratory data analysis on QSAR/QSPR modeling and tautomerism, Union of Scientists in Bulgaria, 31 October - 01 November 2014
 - V.Paskaleva, N.Kochev, O.Pukalov, N.Jeliaskova, Exploratory data analysis on QSAR/QSPR modeling and tautomerism, 2nd Student Chemistry Conference, 21 - 22 November 2014
 - Nikolay T. Kochev, Vesselina H. Paskaleva, Nina Jeliaskova, Algorithms for automatic tautomer generation and their applications, OpenTox Euro 2013 at Johannes Gutenberg University of Mainz, Mainz, Germany, 30 September - 2 October 2013
 - Nikolay T. Kochev, Vesselina H. Paskaleva, Nina Jeliaskova, Algorithms for automatic tautomer generation and their applications, 6th Sheffield Conference on Chemoinformatics at Sheffield, England, 22-24 July 2013
 - N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova, Chemoinformatics Structural Data Processing for QSAR/QSPR modeling, INTERNATIONAL CONFERENCE OF YOUNG SCIENTISTS – PLOVDIV'2013, 13 June 2013
 - N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova, Ambit-Tautomer: An open source tool for tautomer generation, 19th EuroQSAR at Vienna, Austria, August 26-30, 2012
 - N. Kochev, V. Paskaleva, N. Jeliaskova, Automatic generation of tautomers, 9th Chemistry conference of University of Plovdiv, October 2011

09.03.2016г.

ДОКТОРАНТ:


/В. Паскалева/

НАУЧЕН РЪКОВОДИТЕЛ:


/доц. д-р Н. Кочев/

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание от 9.03.2016 Катедреният съвет на КАХКХ се запозна със становището на доц. д-р Николай Кочев, научен ръководител на докторант **Веселина Христова Паскалева** по Област на висше образование - Природни науки, математика и информатика; Професионално направление - **4.2 Химически науки**; Докторантска програма "**Теоретична химия**", с тема на дисертационния труд: **„Компютърно генериране на тавтомери на органични съединения и приложения в химичната информатика“**. Научният ръководител на докторанта внесе предложение за отчисляване на докторант В. Паскалева с право на защита. В своето становище той подчерта, че всички дейности, предвидени в индивидуалния план на докторанта са успешно завършени, работата по окончателно оформяне на дисертационния труд е почти завършена, по темата на дисертацията има 3 публикации и дори са забелязани 7 цитата.

Катедреният съвет единодушно подкрепи предложението на научния ръководител.

Предлагам на ФС на ХФ да утвърди предложението за **отчисляване на докторант Веселина Христова Паскалева с право на защита.**

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 9.03.2016.
2. Становище на доц. д-р Николай Кочев за работата на докторанта.

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц. д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 2.2 от дневния ред беше обсъдено и прието с 9 гласа „за” предложението **Веселина Христова Паскалева**, докторант на самостоятелна подготовка, **да бъде отчислена с право на защита.**

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра АХКХ от 9.03.2016 бе
е разгледан и единодушно приет индивидуален план за работата на
редовен докторант по Аналитична химия **Ваня Йорданова Запрянова**
по тема: **„Изпитване на биоразградими отпадъци”** с научни
ръководители: **гл.ас. д-р Кирил Симитчиев и инж. д-р Елка**
Пискова.

Моля, Факултетният съвет да одобри предложения план на
докторанта.

Прилагам:

1. Индивидуален план за работа на докторант **Ваня Запрянова**
2. Препис извлечение от Протокол на КС на КАХ

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 3.2 от дневния ред беше обсъден и приет с 9 гласа „за” **индивидуалния план за работа на докторант Ваня Йорданова Запрянова.**

09.03.2016

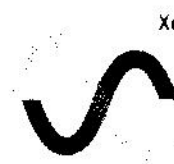
Протоколчик:

/П. Балабанова/



**ПЛОВДИВСКИ
УНИВЕРСИТЕТ
"ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"**

**КАТЕДРА АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ и
КОМПЮТЪРНА ХИМИЯ**



Химически Факултет

ДОКТОРАНТУРА: редовна

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Докторант: **Ваня Йорданова Запрянова**
2. Дата на записване в докторантура: 01.03.2016 година
3. Заповед № РЗЗ - 956 от 26.02.2016 година
4. Срок за завършване на докторантурата: 01.03.2019 година
5. Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика;
професионално направление: 4.2 Химически науки;
докторска програма: Аналитична химия
6. Тема на дисертационната работа:

Изпитване на биоразградими отпадъци

Утвърдена от Факултетния съвет в заседание от 23.02.2016 година
протокол № 177 от 24.02.2016 година

7. Научни ръководители: гл. ас. д-р Кирил Костов Симитчиев и
инж. д-р Елка Николова Пискова
8. Индивидуален план за работа на докторанта, утвърден от Факултетния съвет в
заседание от протокол № / 2016 година

УТВЪРЖДАВАМ: РЕКТОР:

/ проф. д-р Запрян Козлуджов /

ДЕКАН:

/ доц. д-р Веселин Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на дейностите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Методология на научното изследване, литературни източници и бази данни, работа с научна документация, оформяне на научни съобщения и доклади	Лекции 20 h Семинари 30 h СП 100 h	Март – Май 2016 г	Работен модел – база данни
Новости в аналитичната практика и инструменталния анализ	Лекции 20 h Лаб. 50 h СП 150 h	Март – Май 2016 г	Доклад
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2016 г - Март 2017 г	Сертификат
II. РАБОТА ПО ДИСЕРТАЦИЯТА			
Литературна справка по темата на дисертацията	Сам. работа 300 h	Март 2016 г - Март 2017 г	Тримесечни отчети
Овластяване на инструментален метод(и) за анализ	Лаб. 50 h СП 250 h	Май – Юли 2016 г	Практически тест
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 780 h	Септември 2016 г - Март 2017 г	Тримесечни отчети
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 60 h	Септември 2016 г - Март 2017 г	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова /

Научни ръководители:

/ гл. ас. д-р Кирил Костов Симитчиев /

/ инж. д-р Елка Николова Пискова /

ДЕКАН:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на дейностите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Особености в изследователската теория и практика по направлението на темата на докторанта	Консултации и сам. работа 75 h	Март – Май 2017 г	Доклад
Подготовка и полагане на докторантски изпит по специалността (докторантски минимум)	Консултации СП 150 h	Март 2017 г - Февруари 2018 г	Изпит пред комисия
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2017 г - Март 2018 г	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Актуализиране на литературната справка и оформяне на раздела литературен обзор	Консултации и сам. работа 400 h	Март 2017 г - Март 2018 г	Доклад
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 1100 h	Март 2017 г - Март 2018 г	Тримесечни отчети
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 60 h	Март 2017 г - Март 2018 г	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова /

Научни ръководители:

/ гл. ас. д-р Кирил Костов Симитчиев /

/ инж. д-р Елка Николова Пискова /

ДЕКАН:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на дейностите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2017 г - Октомври 2018 г	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Валидиране и оптимизиране на създадените аналитични методи	Консултации и сам. работа 180 h	Март – Юни 2018 г	Доклад
Изготвяне на научни публикации по изследователската тема	Консултации и сам. работа 100 h	Март 2018 г - Януари 2019 г	Тримесечни отчети
Оформяне на раздела резултати и дискусии от дисертационния труд	Консултации и сам. работа 900 h	Март 2018 г - Януари 2019 г	Тримесечни отчети
Подготовка и защита на докторантския труд	Консултации и сам. работа 600 h	Януари 2019 г - Март 2019 г	Предзащита и защита
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 60 h	Март 2018 г - Октомври 2018 г	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова /

Научни ръководители:

/ гл. ас. д-р Кирил Костов Симитчиев /

/ инж. д-р Елка Николова Пискова /

ДЕКАН:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

До Декана на ХФ
при ПУ “Паисий Хилендарски”
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра АХКХ от 9.03.2016 бе
е разгледан и единодушно приет индивидуален план за работата на
редовен докторант по Аналитична химия **Мина Тенева Кирякова** по
тема **„Подобряване на качеството на аналитичните резултати
чрез изследване на бюджета на неопределеност”** с научен
ръководител **доц.д-р Веселин Кметов**

Моля, Факултетният съвет да одобри предложения план на
докторанта.

Прилагам:

1. Индивидуален план за работа на докторант **Мина Кирякова**
2. Препис извлечение от Протокол на КС на КАХ

10.03.2016

Ръководител КАХКХ

доц. д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 09.03.2016

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 9, отсъства ас. Евелина Върбанова

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Приемане на отчети на докторантите
2. Отчисляване на В. Паскалева
3. Приемане на плановете на новите докторанти
4. Текущи въпроси

По точка 3.2 от дневния ред беше обсъден и приет с 9 гласа „за” индивидуалния план за работа на докторант Мина Тенева Кирякова.

09.03.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



**ПЛОВДИВСКИ
УНИВЕРСИТЕТ
"ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"**

Химически Факултет



**КАТЕДРА АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ и
КОМПЮТЪРНА ХИМИЯ**

ДОКТОРАНТУРА: редовна

ИНДИВИДУАЛЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Докторант: **Мина Тенева Кирякова**
2. Дата на записване в докторантура: 01.03.2016 година
Заповед № Р33-958 от 26.02.2016 година
3. Срок за завършване на докторантурата: 01.03.2019 година
4. Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика;
Област на висше образование : 4.2 Химически науки, Докторантска програма
АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ
5. Тема на дисертационната работа:

**Подобряване на качеството на аналитичните резултати, чрез
изчисляване на бюджета на неопределеност**

Утвърдена от Факултетния съвет в заседание от от 23.02.2016
протокол № 177

6. Научен ръководител: доц.д-р Веселин Йорданов Кметов
7. Индивидуален план за работа на докторанта, утвърден от Факултетния съвет в
заседание от протокол № / 2013 година

УТВЪРЖДАВАМ: РЕКТОР:

/ проф. д-р Запрян Козлуджов /

ДЕКАН:

/ доц. д-р В. Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на работите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Методология на научното изследване, литературни източници и бази данни, работа с научна документация, оформяне на научни съобщения и доклади	Лекции 20 h Семинари 30 h СП 100 h	Март – Май 2016	Работен модел – база данни
Новости в аналитичната практика и инструменталния анализ	Лекции 20 h Лаб. 50 h СП 150 h	Май – Октомври 2016	Реферат
Метрология и управление на качеството	Лекции 20 h Семинари 20 h СП 110 h	Март – Май 2016	Изчислителни задачи - изпит
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2016 Март 2017	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Литературна справка	Самост. Работа	Март 2016 Март 2017	Свитък със лит. източници
Овладяване на инструментален метод(и) за анализ	Лаб. 50 h Сам. подготовка 250 h	Април – Юни 2016	Практически тест
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 780 h	Юни 2016 Март 2017	Тримесечни отчети
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Подготовка и провеждане на упражнения със студенти – хроматографски анализ	Лаб. 60 h	Март 2016 Март 2017	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова /

Научен ръководител:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на работите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Подготовка и полагане на докторантски минимум	Консултации Сам. п-ка 150 h	Март 2017 г.- Май 2017 г.	Изпит пред комисия
Особености в изследователската теория и практика по направлението на темата на дисертанта	Лекции 20 h Лаб. 50 h Сам. п-ка 150 h	Март – Юни 2017	Реферат
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2017 Март 2018	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Актуализиране на литературната справка и оформяне на раздел литературен обзор	Консултации и сам. Работа 200 h	Април – Юни 2017	Докладване на работата
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 1380 h	Март 2017 Март 2018	Тримесечни отчети
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти – инструментални методи за анализ - хроматографски анализ	Лаб. 60 h	Март 2017 Март 2018	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Стефанова /

Научен ръководител:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА НА ПОДГОТОВКА

Наименование на работите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. ОБУЧЕНИЕ			
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2017 Юли 2018	Сертификат
II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА			
Валидиране и оптимизиране на създадените аналитични методи	Консултации и сам. работа 180 h	Април – Юни 2018	Докладване на работата
Изготвяне на научни публикации по изследователската тема	Консултации и сам. работа 400 h	Март 2018 Януари 2019	Тримесечни отчети
Оформяне на разделите резултати и дискусии от дисертационния труд	Консултации и сам. работа 600 h	Март 2018 Януари 2019	Тримесечни отчети
Подготовка и защита на докторантския труд	Консултации и сам. работа 600 h	Януари 2019 Март 2019	Предзащита и защита
III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ			
Провеждане на упражнения със студенти – инструментални методи за анализ - хроматографски анализ	Лаб. 30 h	Март 2018 Октомври 2018	Упражнения със студенти

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова /

Научен ръководител:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов /

До Декана
на Химически факултет
при ПУ „П. Хилендарски”
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Кирил Гавазов,
Ръководител катедра ОНХМОХ

Г-н Декан,

Във връзка със зачисляването в докторантура на Златка Христова Гарова (заповед No P33-957 от 26.02.2016) и протокол No 144 от 10.03.2016 от катедрен съвет на КОНХМОХ, на който бе обсъден и приет *Индивидуален учебен план за работа на докторанта*, предлагам на уважаемите членове на ФС на ХФ да гласуват за неговото утвърждаване.

Приложение: *Индивидуален учебен план за работа на докторант Златка Христова Гарова*

Ръководител катедра:



(доц. д-р Кирил Гавазов)

10.03.2016 г.

Пловдив

ПРЕПИС-ИЗВЛЕЧЕНИЕ
ОТ ПРОТОКОЛ № 144/ 10. 03. 2016 г.

Днес, 10.03.2016 год. се проведе катедрен съвет при Катедра "Обща и неорганична химия с Методика на обучението по химия".

Присъстваха членовете на катедрата:

- 9) доц. д-р Кирил Гавазов
- 10) доц. д-р Ваня Лекова
- 11) доц. д-р Йорданка Димова
- 12) гл.ас. д-р Йорданка Стефанова
- 13) гл. ас. д-р Галя Тончева
- 14) гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева
- 15) ас. д-р Кирила Стойнова
- 16) ас. Теодора Стефанова

Отсъства доц. д-р Петя Маринова (в болнични)

Дневен ред:

3. Обсъждане на „Индивидуален учебен план“ на докторант Златка Гарова.

4. Разни.

Дневният ред бе приет единодушно.

По т.1.

Доц. д-р Йорданка Димова представи проект за „Индивидуален учебен план“ на докторант Златка Гарова. Планът бе разгледан внимателно от членовете на катедрата. Предложения за неговото подобряване бяха изказани от доц. д-р К. Гавазов и доц. д-р В. Лекова. Участие в дискусията взеха доц. д-р Димова, гл.ас. д-р Йорданка Стефанова ас. д-р Кирила Стойнова и ас. Теодора Стефанова.

Достигна се до консенсус и се премина се към гласуване. Планът бе приет единодушно – 8 гласа „за“.

10.03.2016 г.

гр. Пловдив

Ръководител катедра:.....
(доц. д-р Кирил Гавазов)

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО И НАУКАТА
ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ “ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”

Докторантура: редовна

Химически факултет
Катедра Обща и неорганична химия
с методика на обучението по химия

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Име, презиме, фамилия Златка Христова Гарова
2. Дата на записване в докторантура 01.03.2016 година
3. Заповед № Р33-957 от 26.02.2016 година
4. Срок за завършване на докторантурата – 01.03.2019 г.
5. Област на висше образование 1. Педагогически науки
6. професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по...
докторска програма „Методика на обучението по химия“
7. Тема на дисертационния труд „Обогатяване на научната грамотност на учениците
чрез изследователска дейност в СИП по химия и опазване на околната среда“,
утвърдена от ФС, протокол №177 от 23.02.2016 г.
7. Научен ръководител доц. д-р Йорданка Димитрова Димова
8. Индивидуалният учебен план за работа е утвърден от ФС протокол №178 от
15.03.2016 г.

УТВЪРЖДАВАМ: РЕКТОР:
(проф. Д-р Запрян Козлуджов)

ДЕКАН:
(доц. д-р Веселин Кметов)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Документация
I. Научноизследователска дейност 1. Литературно проучване на изследвания в областта на обучението по природни науки, свързани с научната грамотност (science literacy) на учениците и на ключовата компетентност по науки и технологии (key competences in science and technology); описание и систематизиране на предхождащи изследвания на научната грамотност в областта на обучението по химия 2. Разработване на идеен проект за педагогическото изследване 3. Подготовка и провеждане на предварителен педагогически експеримент, анализ и публикуване на резултатите	01.03. – 20.12. 2016 г. 01.07. – 15.09. 2016 г. 15.09.2016 г. – 31.01.2017 г.	Изготвена библиографска справка; текст – първа глава на дисертацията Доклад и обсъждане на семинар Публикация, участие в конференция
II. Обучение Курс „Методология и методи на педагогическите изследвания” Курс „Теория и методология на химическото образование” (докторантски минимум) Факултативен курс „Английски език“	01.03. – 01.06. 2016 г. 01.09. – 20.12. 2016 г. 15.09.2016 – 31.01.2017 г.	Оценка от курсова работа Оценка от изпит Сертификат
III. Педагогическа дейност 10 учебни часа с магистри от курса „Учител по химия“; 20 учебни часа със студенти от курса „Учител по химия” (СДК – неспециалисти)	2015/2016 учебна година	

Ръководител на катедра:.....
(доц. д-р Кирил Гавазов)

Научен ръководител:.....
(доц. д-р Йорданка Димова)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Документация
I. Научноизследователска дейност 1. Подготовка и провеждане на основен педагогически експеримент 2. Анализ и публикуване на резултатите	01.03. – 01.07.2017 г. 01.07. – 01.12.2017 г.	Публикация, участие в конференция; текст - втора глава на дисертацията
II. Обучение Избираем курс „Психология“ Избираем курс „Педагогика“ Факултативен курс „Английски език“	01.03. – 01.06. 2017 г. 01.09. – 20.12. 2017 г. 15.09.2017 – 31.01.2018 г.	Оценка от курсова работа Оценка от курсова работа Сертификат
III. Педагогическа дейност 30 учебни часа в зависимост от учебния план на катедрата	2016/2017 учебна година	

Ръководител на катедра:.....
(доц. д-р Кирил Гавазов)

Научен ръководител:.....
(доц. д-р Йорданка Димова)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Документация
I. Научноизследователска дейност 1. Подготовка и провеждане на заключителен педагогически експеримент 2. Анализ и публикуване на резултатите	01.03. – 01.07.2018 01.07- 01.12.2017 г.	Текст - трета глава на дисертацията Публикация, участие в конференция
II. Изготвяне на дисертационния труд 1. Формулиране на изводи и на приноси 2. Съставяне и редактиране на текста на дисертационния труд 3. Предзащита на дисертацията	01.07. – 20.12. 2018 г. 01.02. – 28.02. 2019 г.	Ръкопис на дисертационния труд Проведена предзащита
III. Обучение Курс „Актуални проблеми на обучението по природни науки”	01.05-01.06. 2018 г.	Оценка от курсова работа
IV. Педагогическа дейност 30 уч. часа в зависимост от учебния план на катедрата	2017/2018 учебна година	

Ръководител на катедра:.....
(доц. д-р Кирил Гавазов)

Научен ръководител:.....
(доц. д-р Йорданка Димова)

До Декана
на ПУ "П. Хилендарски"
Тук

ДОКЛАД

от доц. д-р Мария Йорданова Ангелова-Ромова,
Ръководител катедра „Химична технология“

Господин Декан,

Моля да бъде редуциран норматива за учебна натовареност на гл. ас. д-р Олга Тенчева Тенева на 260 ч. поради ползване на неплатен отпуск (съгласно чл. 160, ал. 1, КТ) за периода от 01.02.2016 г. до 01.02.2017 г.(вкл.) по лични причини.

Предложението е обсъдено и прието единодушно на Катедрен съвет. Прилагам препис от протокола и заповед от ректора за разрешаване на неплатения отпуск.

10.03.2016 г.

Ръководител кат. ХТ:

(доц. д-р М. Ангелова-ромова)





Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"
Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 98

от катедрено съвещание

Препис

Днес 09.02.2016 год. се състоя съвещание на кат. Химична технология.

Присъстваха: проф. д-р М. Златанов, доц. д-р Г. Антова, доц. д-р М. Ангелова-Ромова, доц. д-р Г. Патронов, гл. ас. д-р Ж. Петкова, ас. И. Костова, хим. Ж. Симеонова, доц. д-р Д. Тончев и гл. ас. д-р О. Тенева – отсъстват (в неплатен отпуск).

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Кадрови въпроси

Членовете на Катедрения съвет разгледаха предложението да бъде редуциран норматива за учебната натовареност на гл. ас. д-р Олга Тенева Тенева на 260 ч. поради ползване на неплатен отпуск (съгласно чл. 160, ал. 1, КТ) за периода от 01.02.2016 г. до 01.02.2017 г. по лични причини.

Членовете на Катедрения съвет приеха единодушно предложението до Факултетния съвет, да се редуцира учебната натовареност на гл. ас. д-р Олга Тенева.

Протоколирал:


(хим. Ж. Симеонова)

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

ДОКЛАД

от доц. д-р Виолета Стефанова

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание от 14.03.2016 Катедреният съвет на КАХКХ се запозна с проекта за дисертационен труд за научната степен „доктор на науките“ на доцент д-р **Пламен Николов Пенчев** по Област на висше образование - Природни науки, математика и информатика; Професионално направление - 4.2 Химически науки; Направление "Аналитична химия", с тема на дисертационния труд: **„КОМПЮТЪРНА ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НА МОЛЕКУЛНИ СПЕКТРИ, С ЦЕЛ РАЗКРИВАНЕ НА СТРУКТУРАТА НА ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ“**. Предоставените материали съдържат: проект на дисертационен труд; проект на автореферат; списък със статии и забелязани цитати, които са обект на предложението труд, както и декларация за съответствие на наукометричните показатели със специфичните изисквания на Химическия факултет на ПУ „П.Хилендарски“. Предоставените от кандидата материали отговарят на всички изисквания на ЗРАСРБ, Правилника за прилагането му, съответния Правилник на ПУ „Паисий Хилендарски“ и специфичните изисквания на Химическия факултет.

На заседанието та КС бяха поканени като гости проф. дхн Георги Андреев и доц. д-р Петко Бозов. След обсъждане на проекта за дисертационен труд, Катедреният съвет на КАХКХ взе единодушно решение да подкрепи предложението до ФС на ХФ да се открие процедура за предварително обсъждане.

Във връзка с това, предлагам на ФС на ХФ да приеме предложението за разкриване на процедура за предварително обсъждане на проекта за дисертационен труд за придобиване на научната степен „ДОКТОР НА НАУКИТЕ“ на **доц. д-р Пламен Николов Пенчев** на тема: **КОМПЮТЪРНА ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НА МОЛЕКУЛНИ СПЕКТРИ, С ЦЕЛ РАЗКРИВАНЕ НА СТРУКТУРАТА НА ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ“** по Област на висше образование - Природни науки, математика и информатика; Професионално направление - 4.2 Химически науки; Направление "Аналитична химия".

Прилагам препис-извлечение от протокола на катедрения съвет, проведен на 14.03.2016.

14.03.2016

Ръководител КАХКХ



доц. д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание
на катедра "Аналитична химия и КХ"
от 14.03.2016

ПРОТОКОЛ № 5

На 14.03.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав 10

Присъстват 10: доц. В. Кметов, доц. В. Стефанова, доц. П. Пенчев, доц. Н. Кочев, гл.ас. А. Терзийски, гл.ас. Д. Георгиева, гл.ас. К. Симитчиев, гл.ас. О. Пукалов, ас. Е. Върбанова, ас. С. Цонева.

Гости: проф. Г. Андреев и доц. П. Бозов

Необходим брой за положителен избор 6

Дневен ред:

1. Откриване на процедура за предварително обсъждане на дисертационен труд за присъждане на научна степен
2. Текущи въпроси

По точка 1 от дневния ред беше изслушан проект за дисертационен труд за присъждане на степен доктор на химическите науки на доц. д-р Пламен Пенчев.

След презентацията въпроси и мнения по работата бяха дадени от доц. П. Бозов, доц. Н. Кочев и проф. Г. Андреев. След дискусията проектът за дисертационен труд беше подложен на гласуване и приет с 10 гласа „за“.

Предлагаме на ФС на ХФ да бъде открита процедура за предварително обсъждане на дисертационен труд на тема „Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на структурата на органични съединения“ за присъждане на научна степен „доктор на химическите науки“ на доц. д-р Пламен Николов Пенчев по Област на висше образование - Природни науки, математика и информатика; Професионално направление - 4.2 Химически науки; Направление "Аналитична химия"

14.03.2016

Протоколчик:


/П. Балабанова/