

До Декана
на Химически факултет

ДОКЛАД
от Стела Статкова

Предложения за организиране и провеждане на КСК-2017

Господин Декан,

Във връзка с организацията и провеждането на КСК-2017г, внасям следното предложение:

ФС да обсъди и приеме следните решения във връзка с организиране на кандидатстудентската кампания през 2017 година:

- 1) Да се проведе състезание по химия в две форми – състезание с реферат и състезание с тест, както следва:
 - състезание с реферат – на 10 февруари 2017;
 - състезание с тест – 28 януари и 04 февруари, а при наличие на желаещи в други населени места и изнесено провеждане на състезанието.
 - с оценките от проведените състезания, кандидат-студентите могат да участват в класирането за специалностите в Химическия факултет;
 - с оценките от проведеното състезание през 2016 година, желаещите могат да участват в предварителното записване или редовно класиране за специалностите в Химическия факултет.
- 2) С оценките от националната олимпиада и националните състезания по химия през 2017 година, желаещите могат да участват в класирането за специалностите в Химическия факултет;
- 3) С оценка от Държавен изпит за придобиване на професионална квалификация по професиите „химик – технолог”, „лаборант” и „еколог” през 2017 година, желаещите могат да участват в класирането за специалностите в Химическия факултет;
- 4) Да се проведе предварителен кандидат-студентски изпит по химия през юни 2017 г. и редовен изпит по химия през юли 2017 г.;
 - кандидат-студентският изпит по химия да бъде явен (без засекретяване и разсекретяване на материалите).

- 5) Кандидат-студентите могат да се запишат предварително в желана от тях специалност с формиране на максимален бал 36.00, ако са получили оценка най-малко много добър 5.50 от предварителен изпит или от олимпиади, състезания, форуми с конкурсен характер и др. (международни, национални, регионални, университетски) по химия.
- 6) Приемът по специалности в Химическия факултет през 2017 година – държавна поръчка да бъде, както следва:

№	ОКС и специалност	Прием
	<i>ОКС Бакалавър</i>	
1.	Химия – задочно обучение	
2.	Химия – редовно обучение	
3.	Компютърна химия	
4.	Медицинска химия	
5.	Химия с маркетинг	
6.	Анализ и контрол	
7.	Химия с английски език	-
8.	Екологична химия	-
9.	Химия и физика	-
	Общо:	

- 7) Образоването на бала за всички специалности в Химическия факултет да се изчислява по формулата:

Химически факултет		
- Химия (Р, 3) - Компютърна химия (Р) - Медицинска химия (Р) - Химия с маркетинг (Р) - Анализ и контрол (Р)	4xИ+2xО	И: КСИ (<i>Химия</i> или <i>Физика</i> или <i>Математика</i> или <i>Биология</i> или <i>Български език</i>) или ДЗИ (<i>Химия и опазване на околната среда</i> или <i>Физика и астрономия</i> или <i>Математика</i> или <i>Биология и здравно образование</i> или <i>Български език и литература</i>) О: Химия

КСИ – кандидатстудентски изпит; ДЗИ – Държавен зрелостен изпит; Р – редовно обучение; 3 – задочно обучение И – изпит; О – оценки от дипломата за средно образование.

11.11.2016

С уважение: С. Статкова

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” беше обсъдено предложение за промяна на названието на учебната дисциплина „*Химиметрия*“ с хориум 30/30/0, включена в УП на специалност *Анализ и контрол* (5 семестър) да бъдат променени на „*Хеометрия*“ с хориум 30/0/30. Специалистите в тази област, проф. д-р П. Пенчев и доц. д-р Н. Кочев, подчертаха, че промяната съответства утвърдилото се название на този относително нов дял от химичната наука. Лекционният курс по тази дисциплина за специалност Анализ и контрол се води съвместно с аналогичната дисциплина „*Хеометрия*“, която е залегнала в учебния план на специалност *Компютърна химия* и е целесъобразно двете дисциплини да носят еднакво наименование. Практическите занятия се провеждат в компютърните зали и изискват работа с компютърните системи, разположени там, затова авторът на учебната програма счита за целесъобразно семинарните занятия да се трансформират в упражнения.

КС обсъди и единодушно прие предложението за уеднаквяване на наименованието и хориумите на дисциплините в двата учебни плана за Компютърна химия и Анализ и контрол.

Моля, Факултетният съвет да одобри направеното предложение за промяна.

Прилагам препис-извлечение от протокола на катедрения съвет.

09.11.2016

Ръководител КАХХХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.1 от дневния ред беше обсъдено и прието с 9 гласа „за” предложението за промяна в названието и хорариума на учебна дисциплина, включена в учебния план на специалност **„Анализ и контрол”** (5 семестър) – дисциплината „Химиметрия” с хорариум 30/30/0 да бъдат променени на **„Хеометрия”** с хорариум 30/0/30.

09.11.2016

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” беше обсъдена учебна програма за дисциплина „*Хеометрия*“, включена в учебния план на специалност *Анализ и контрол*. След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие на програмата изготвена от проф. дхн П.Пенчев.

Моля, Факултетният съвет да одобри представената учебна програма по дисциплина „*Хеометрия*“, включена в учебния план на специалност Анализ и контрол.

Прилагам приетата на КС програма и препис-извлечение от протокола на катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.2 от дневния ред беше обсъдена и приета с 9 гласа „за”
предложената учебна програма за дисциплината „Хеометрия” от учебния
план на специалност „Анализ и контрол” – 3 курс (5 семестър).

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



П Л О В Д И В С Ж Н И В Е Р С И Т Е Т " П А И С И Й И Л Е Н Д А Р С К И "

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

У Ч Е Б Н А П Р О Г Р А М А

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Анализ и контрол (редовно обучение)

О П И С А Н И Е

Наименование на курса

Хеометрия

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

трета

Семестър

V

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

Учебни резултати за курса

Анотация

Целта на курса по Хемометрия е студентите да придобият теоретични и практически познания за основните методи за анализ на многомерни данни, които са резултат от химични експерименти. Курсът включва също така запознаване и работа с професионален софтуер за обработка на данни. Студентите получават необходимата основна подготовка за съставяне и обработка на данни от различните химични експерименти, избор на метод за анализ, както и интерпретация на резултатите от проведения анализ на данни.

Акцент е поставен върху методите за кластерен анализ, анализ на главните компоненти (принципен компонентен анализ) и работа с данните в спектрални библиотеки.

Получените знания спомагат за усвояване на материала в последващата химична дисциплина *Контрол и управление на качеството на химичните изпитвания*.

Дисциплината *Хемометрия*, въпреки че се преподава преди дисциплината *Молекулен спектрален анализ*, но от същия преподавател, въвежда примери за спектрални данни като обекти за хемометричен анализ, което от своя страна спомага за допълнително разбиране на спектралните данни и приложението на компютърни методи за анализ на спектрална информация.

Компетенции

Успешно завършилиите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- Принципите, класификацията, предимствата и ограниченията на хемометричните методи за анализ на данни.
- Областите на приложимост на различните хемометрични методи.
- Изискванията при съставянето на бази от данни, взети от резултатите на различните химични експерименти.
- Принципите за обработка на данни (нормиране, скалиране, центриране и т.н.).
- Принципите и основите на различните хемометрични методи, изучавани в курса.
- Критериите за избор на подходящ метод за анализ на данните въз основа на вида на резултатите от различните химични експерименти и поставената изследователска задача.
- Да интерпретират резултатите от анализа на данните.

2. Ще могат:

- Да прилагат различните методи за предварителна обработка на данните – скалиране, центриране и т.н.
- Да обработват малка извадка от данни, чрез директно прилагане на методите на хемометрията и чрез работа с програмата *Excel*.
- Да обработват средни и големи извадки от данни, чрез директно прилагане на методите на хемометрията и чрез работа с професионалния софтуер *Statistica*.
- Да прилагат методите на линейната многопроменлива регресия, невронните мрежи, кластерния анализ и на най-близките съседи към различни химични данни.
- Да интерпретират резултатите от хемометричния анализ и да оценяват тяхната надеждност (верност).

Начин на преподаване

Аудиторно: 60 ч.

- Лекции (30 часа),
- Семинарни упражнения (30 часа)

Извънаудиторно: 90 ч

- Самостоятелна подготовка
- Курсова работа
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: *Математика; Компютри и софтуер; Статистика и метрология в химията.*

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да познават и боравят свободно с основните математични понятия като *вектор, матрица, детерминанта, производна.*
- Да са запознати с операционната система *Windows.*
- Да имат задълбочени познания за работа с програмите *Word* и *Excel.*
- Да разбират и боравят свободно с основните понятия от базите данни и програмирането.
- Да знаят основите на химичната информатика.
- Да са запознати задълбочено с основните понятия на статистика и метрология в химията – средна величина, стандартно отклонение, медиана, дисперсия, математическо очакване, разпределение на случайна величина, функция на разпределение, плътност на разпределение.
- Да са запознати задълбочено с еднопроменливата регресия и нейното приложение за калибрирането по сигнал/концентрация.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Компютърна квалиметрия.

Техническо осигуряване на обучението

- Компютърна зала с 10 компютъра, работещи в среда на *Windows* и разполагащи с програмите *Word* и *Excel.*
- 60 909 мас-спектри на органични съединения (безплатно разпространяватa спектрална сбирка на NIST)
- 1000 ИЧ спектри на органични съединения, закупени по предишен проект на колектив от катедрата.
- 900 ИЧ спектри на органични съединения, измерени от дипломанти и колеги от катедрата.
- 200 Раман спектри на органични съединения, измерени от дипломанти и колеги от катедрата.
- Демонстрационна сбирка от 350 ИЧ спектри и софтуер, към апарата VERTEX 70 FT-IR spectrometer (Bruker Optics)

- Демонстрационна сбирка от 246 Раман спектри и софтуер, към Раман спектрометъра RAM II (Bruker Optics).
- Един лиценз на професионалната статистическа програма *Statistica 10* (2010 г.), закупена по предишен проект на колектив от катедрата.
- Три компютърни програми (*BinCalss*, *IRMassClass* и *IRIS*), работещи под Windows и програмирани от лектора, специално за преподаване на методите на хеометрията.
- Компютърна програма под Windows за съставяне и провеждане на изпитни тестове, която е програмирана от лектора.

Съдържание на курса

Курсът включва преподаване на теоретичните основи, предимствата и ограниченията на хеометричните методи за анализ на данни. Теоретичните основи се разглеждат с помощта на разбираема за студентите математика и представляват задълбочаване на знанията на студентите от съответните области на линейната алгебра и химичната информатика. В курса се набляга предимно на рутинните методи за анализ на хеометрични данни: анализ на главните компоненти, кластерен анализ, метод на най-близките съседи, както и се въвежда съвременната концепция (парадигма) за разпределено представяне на знанията, известна като изкуствени невронни мрежи.

Обърнато е внимание на ограниченията на различните хеометрични методи, както и на възможните области на тяхното приложение. Акцентува се и върху интерпретацията резултатите от анализа на данните и нейната връзка с поставената химична задача.

Упражненията имат за цел да дадат практически знания и опит за решаване на въпроси от ежеднезната химическа практика като (1) избор и числено представяне на данните, (2) предварителна обработка на данните, (3) избор на подходящ хеометричен метод, (4) възможност за прилагане на други хеометрични методи, както и сравнение на техните резултати, (5) интерпретация на резултатите и тяхното валидиране.

Практическите занятия включват (1) запознаване с основните понятия на хеометриката – химичен обект и химично събитие, химичен образ, размерности на данните, (2) съставяне на обучаваща, тестваща и валидираща извадки, (3) прилагане на различните хеометрични методи за малки извадки, чрез работа в програмата Excel, (4) прилагане на различните хеометрични методи за средно големи извадки в програмата Statistica, (5) решаване на различни класификационни задачи с реални данни, като интерпретация на ИЧ и мас-спектри, търсене в спектрални библиотеки, анализ на замърсявания на води, оптимизиране на химичен анализ и химичен процес.

Студентите се поощряват да работят по двойки на всеки компютър, където дискусията между тях запълва празнотите в техните теоретични знания, както и всеки от тях да има собствена тетрадка за записки (надписана от тях и подписана от лектора), която могат да използват при колоквиума и изпита по дисциплината. По време на практическите занятия, студентите се запознават с различни справочни пособия, като спектрални атласи и сбирки на перфокарти, референтни книги за свойствата на химичните съединения и компютърни спектрални библиотеки.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

A/Лекции по Хеометрия

Тема	часове
1. Случайна Величина и статистически оценки на параметрите на разпределението. Едномерни данни и многомерни данни в химичния експеримент. Параметрични и непараметрични хеометрични методи. Баесиянова класификация: проблеми при многомерните данни.	2
2. Многомерно пространство на образите и разстояние в него. Химични обекти и събития, многомерни образи. Двоични образи. Пространство на образите. Мерки за разстояние в пространството на образите.	2
3. Класификация по разстоянието до центроидите на извадката. Центроид. Метод на центроидите. Нагледно представяне на метода. Разделяща повърхност.	2
4. Класификация с линейна обучаваща машина. Алгоритъм. Разделяща хиперравнина. Обучение.	2
5. Хеометрични методи – обзор. Структуриране на данните. Класификацията на хеометричните методи. Прилагане на хеометричните методи. За данните и не само за тях. Конструирание на обучаваща, тестваща и валидираща извадки. Скалиране на данните в извадките.	2
6. Кластерен анализ. Метод на единичната, средната и пълната връзка. Многобройните приложения на метода в химията и спектроскопията.	2
7. Приложение на линейната алгебра в хеометриката. Решаване на системи от линейни уравнения, когато броят на неизвестните е по-малък от броя независими уравнения или т.н. линейно параметризиране в науката. Линейна еднопроменлива и многопроменлива регресия: прилики и разлики. Работа със статистически програми.	2
8. Приложение на линейната многопроменлива регресия за изчисляване на топлини на образуване на алкани. Дефиниция на топлина на образуване. Топлини на химични реакции. Изчисляване на стандартните топлини на образуване на алкани с помощта на адитивна схема.	2
9. Многокомпонентен анализ на смеси чрез техните УВ-Вид спектри. Електронни спектри на смес от вещества. Многокомпонентен анализ на смеси от вещества.	2
10. Моделиране на химичния експеримент. Моделиране. Видове фактори. Основни етапи на моделирането. Активен експеримент при две нива на входните фактори.	2
11. Спектрално подобие: използване в спектроскопията. Спектрални признаци. Спектралната крива като вектор и като образ. Сравняване на спектрални криви. Търсене в спектрални библиотеки. Химична структура на библиотечните спектри.	2
12. Метод на най-близките съседи. Класификация на ИЧ и Раман спектри с метода.	2
13. Изкуствени невронни мрежи (ИНМ). ИНМ с право разпространение на сигналите. Обучение на ИНМ.	2
14. Линеен дискриминантен анализ. Анализ на главните компоненти. Сравнение на двата метода.	2
15. Колоквиум.	2
Общ брой часове:	30

Форми на текущ контрол:

I Два колоквиума върху принципите и прилагането на хеометричните методи (активен тест с изчислителни задачи, построяване на дендограми, кластериране и класифициране на тримерни или четиримерни образи). Провеждат се през 12-та и 15-ма седмица от семестъра.

Б/ Упражнения по Хемометрия

тема	часове
1. Упражнение. Случайна Величина и статистически оценки на параметрите на разпределението. - Инструктаж за техническа безопасност за работа с ток и компютри. - Едномерно и многомерно разпределена случайна величина. - Статистическа сигурност, ниво на значимост, интегрални граници, грешки от първи и втори род. Работа със статистически таблици и преглед на статистическите функции в програмата Excel.	2
2. Упражнение. Увод в хемометрията - Химичен обект, химично събитие и изготвяне от тях на химичен образ. - Реални и двоични образи. Пространство на образите и разстояния в него. - Изчисления на разстояния между химични образи – в тетрадката и с програмат Excel. - Разпознаване на цифри с програмата <i>BinCalss</i>. - Класификация на ИЧ и мас-спектри с програмата <i>IRMassClass</i>.	4
3. Упражнение. Класификационни методи - Класификация на ИЧ спектри с метода на центроидите в програмата Excel. - Класификация на ИЧ спектри с метода на линейната обучаваща машина в програмата Excel. - Класификация на мас спектри с метода на центроидите в програмата <i>IRMassClass</i>. - Класификация на мас спектри с метода на линейната обучаваща машина в програмата <i>IRMassClass</i>.	4
4. Упражнение. Кластерен анализ - Кластериране на ИЧ спектри в програмата Excel и ръчно построяване на дендограмата. - Кластериране на същите ИЧ спектри с програмата <i>Statistica</i> и сравнение на резултатите. Интерпретация на резултатите.	2
5. Упражнение. Регресионни методи. - Обобщена (псевдо-) обратна матрица и нейното намиране с програмата <i>Excel</i>. - Изчисляване на адитивна схема за топлини на образуване на алкани.	4
6. Упражнение. Регресионни методи. - Многокомпонентен анализ на три аминокиселини. - Активен експеримент при две нива на входните фактори.	4
7. Упражнение - Колоквиум върху материала от упражнения 2, 3, 4, 5 и 6. - Класификация на ИЧ спектри с изкуствени невронни мрежи	4
8. Упражнение. Метод на най-близките съседи - Търсене в спектрални библиотеки от ИЧ и Раман спектри. - Илюстрация на методите за търсене за идентификация и търсенето по подобие. - Анализ на резултатите от търсенето в библиотеката с помощта на метода на най-близките съседи.	4
9. Упражнение. Други химични приложения на хемометричните методи - Линеен дискриминантен анализ. Класификация на ИЧ и мас-спектри с метода. - Анализ на главните компоненти, приложен към данни от хроматографски анализи и сравнение на резултатите с тези, получени с кластерен анализ.	2
Общ брой часове:	30

В/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да изработят **курсова работа**, състоящата се в класифицирането на 2 ИЧ спектъра с метода на линейната обучаваща машина, чрез програмата Excel. Всеки студент получава по Интернет кратко описание на проблема и Excel-ски файл с данните. Обучаващата извадка е от 10 тримерни спектъра (по три спектрални признака на обект). До десетата седмица студентите изпращат своята работа на лектора по електронната поща. Изработването на курсова работа е задължително и е свързано със заверката на семестъра.

Библиография

<i>Автор</i>	<i>Заглавие</i>	<i>Издателство</i>	<i>Година</i>
Пенчев П.	Хеометрия – курс лекции. Е-ресурс	В Интернет (https://students.uni-plovdiv.net/)	2014
Пенчев П.	Хеометрия – курс упражнения. Е-ресурс	В Интернет (https://students.uni-plovdiv.net/)	2014
Brereton R.G.	Applied Chemometrics for Scientists	John Wiley & Sons, Chichester	2007
Футеков Л., Пенчев П.	Теория на експеримента	Изд. ПУ	1998
Шараф М. А., Иллмэн Л., Ковальски Б.Р.	Хеометрика	Химия, Ленинград	1989
Massart D.L., Vandeginste B.G.M., Deming S.N., Michotte Y., Kaufman L.	Chemometrics: A Textbook	Elsevier, Amsterdam	1988
Пенчев П.	Свитък с помощни материали по Хеометрия. Обновяван всяка година.	Интернет и печатна версия	2006-2012

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, в която са дадени основния принцип на съответния хеометричен метод, графики и друго представяне на данните, както и схематичното описание на някои от алгоритмите. Самата презентация е достъпна за студентите от Интернет страницата на лектора <http://web.uni-plovdiv.bg/plamenpenchev> и <https://students.uni-plovdiv.net/>.

Допълнително в лекциите се извеждат от преподавателя на дъската някои от основните уравнения, за да се покаже на студентите физическия смисъл на разделящите равнини при класификационните хеометрични методи. Също така на лекции се извършват изчисления от преподавателя на разстояния в пространството на образите, както и изваждане и събиране на образи, умножение на образ с число, намиране на среден образ (центроид), умножение на матрици. В хода на лекциите лекторът построява кластерите и дендограмите на кластерния анализ по данни, прожектирани с мултимедийния проектор.

През семестъра са планирани два колоквиума, оценката от които участва във формиране на крайната оценка по дисциплината. На студентите се дават примерни колоквиуми, които са ксерокс-копие от колоквиумите на отличници от предишни години. Всяка година материалът в колоквиумите се променя и осъвременява.

Лекциите са придружени и с практически курс, който се състои от упражнения, провеждани в обзаведената за целта компютърна зала. Упражненията са задължителни. Занятията включват:

- подробен инструктаж за правилата за безопасност в компютърна зала и при работа с компютри – студентите се подписват в специална тетрадка, че са преминали инструктажа
 - решаване на изчислителни задачи с малки по размерност образи в тетрадката и на дъската: изваждане и събиране на образи, умножение на образ число, намиране на среден образ (центроид)
 - работа в програмата Excel с образи при класификацията по центроиди и метода на линейната обучителна машина
 - работа в програмата Excel при изготвяне на адитивни схеми за топлини на образуване и за предсказване на сигналите на протонни ЯМР спектри
 - работа в програмата Excel със УВ-Вид спектри при многокомпонентен анализ на смеси
 - Изчисляване на разстояния между образи в програмата Excel и последващо кластериране в тетрадката по метода на единична връзка
 - работа с Windows програми (програмирани от лектора на курса) за класификация на образи и търсене в библиотеки от ИЧ спектри
 - работа с професионалната програма Statistica при кластериране на ИЧ спектри
- В рамките на курса има планирана самостоятелна курсова работа.

Методи и критерии на оценяване

Изпитването по дисциплината се състои от провеждане на един колоквиум по време на упражненията, един по време на лекциите и краен изпит по време на изпитната сесия.

За колоквиума всеки студент получава лист със задачи, които решава и резултатите се записват в листа със задачи. Студентът има право да използва всички учебни материали, отбелязани в литературата по дисциплината, и единствено своята тетрадка без никакви “хвърчащи” листове. Крайният семестриален изпит се провежда като пасивен тест на компютър. Има изготвени три теста по 12, 12 и 16 въпроса, всеки въпрос в четири варианта, които се избират случайно от компютъра. Всеки въпрос има пет отговора, от които само един е верен. Времето за решаване на даден въпрос от теста се задава от компютъра. При теста могат да се използват записки или други учебни материали.

Оценяване:

Крайната оценка по дисциплината се формира от оценката на колоквиумите, *Ko1* и *Ko2*, оценката от курсовата работа, *KP*, и оценката от теста, *Тест*, по формулата:

$$\text{Оценка} = Ko1 * 0.20 + Ko2 * 0.20 + KP * 0.10 + \text{Тест} * 0.50$$

Всички писмени работи (от колоквиума), тетрадката с присъствията и текущите оценки и всички файлове с резултати от компютърния тест се съхраняват в

продължение на 3 години от датата на провеждане на семестриалния изпит. Изработените от студентите файлове с курсовата работа се качват на Интернет страницата на преподавателя с цел прозрачност на оценяването на студентите.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

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” беше обсъждана промяна в учебната програма за дисциплина **„Хеометрия“**, включена в учебния план на специалност Компютърна химия. Проф. дхн П.Пенчев, обясни, че промяната е продиктувана от разработването на нови учебни ресурси, разработени от лектора в рамките на проект за създаване на електронни учебни материали. След подробно обсъждане катедреният съвет единодушно прие на програмата изготвена от проф. дхн П.Пенчев.

Моля, Факултетният съвет да одобри обновената учебна програма по дисциплина **„Хеометрия“**, включена в учебния план на *специалност Компютърна химия*.

Прилагам приетата на КС програма по **„Хеометрия“** и препис-извлечение от протокола на заседанието на катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.3 от дневния ред бяха обсъдени промени в учебната програма на дисциплината „*Хеометрия*” от учебния план на специалност „*Компютърна химия*”.

Предложението се гласува и прие с 9 гласа „за”

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



П Л О В Д И В С Ж Н И В Е Р С И Т Е Т " П А И С И Й И Л Е Н Д А Р С К И "

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

У Ч Е Б Н А П Р О Г Р А М А

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Компютърна химия (редовно обучение)

О П И С А Н И Е

Наименование на курса

Хеометрия

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

трета

Семестър

V

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

Учебни резултати за курса

Анотация

Целта на курса по Хемометрия е студентите да придобият теоретични и практически познания за основните методи за анализ на многомерни данни, които са резултат от химични експерименти. Курсът включва също така запознаване и работа с професионален софтуер за обработка на данни. Студентите получават необходимата основна подготовка за съставяне и обработка на данни от различните химични експерименти, избор на метод за анализ, както и интерпретация на резултатите от проведения анализ на данни.

Получените знания са необходимата основа за усвояване на материала в последващите химични дисциплини *Компютърно моделиране в химията* и *Биоинформатика*, както и избираемата дисциплина *Изкуствени невронни мрежи*.

Дисциплината *Хемометрия* се преподава успоредно с дисциплината *Инструментални методи за анализ* в същия семестър и от същия преподавател, което позволява спектрални данни от втората дисциплина да бъдат обекти за хемометричен анализ, което от своя страна спомага за допълнително разбиране на спектралните данни и приложението на компютърни методи за анализ на спектрална информация.

Компетенции

Успешно завършилият обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- Принципите, класификацията, предимствата и ограниченията на хемометричните методи за анализ на данни.
- Областите на приложимост на различните хемометрични методи.
- Изискванията при съставянето на бази от данни, взети от резултатите на различните химични експерименти.
- Принципите за обработка на данни (нормиране, скалиране, центриране и т.н.).
- Принципите и основите на различните хемометрични методи, изучавани в курса.
- Критериите за избор на подходящ метод за анализ на данните въз основа на вида на резултатите от различните химични експерименти и поставената изследователска задача.
- Да интерпретират резултатите от анализа на данните.

2. Ще могат:

- Да прилагат различните методи за предварителна обработка на данните – скалиране, центриране и т.н.
- Да обработват малка извадка от данни, чрез директно прилагане на методите на хемометрията и чрез работа с програмата *Excel*.
- Да обработват средни и големи извадки от данни, чрез директно прилагане на методите на хемометрията и чрез работа с професионалния софтуер *Statistica*.
- Да прилагат методите на линейната многопроменлива регресия, невронните мрежи, кластерния анализ и на най-близките съседи към различни химични данни.
- Да интерпретират резултатите от хемометричния анализ и да оценяват тяхната надеждност (верност).

Начин на преподаване

Аудиторно: 60 ч.

- Лекции (30 часа),
- Семинарни упражнения (30 часа)

Извънаудиторно: 90 ч

- Самостоятелна подготовка
- Курсова работа
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: **Математика; Компютри и софтуер; Химическа информатика; Статистика и метрология в химията.**

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да познават и боравят свободно с основните математични понятия като *вектор, матрица, детерминанта, производна*.
- Да са запознати с операционната система *Windows*.
- Да имат задълбочени познания за работа с програмите *Word* и *Excel*.
- Да разбират и боравят свободно с основните понятия от базите данни и програмирането.
- Да знаят основите на химичната информатика.
- Да са запознати задълбочено с основните понятия на статистика и метрология в химията – средна величина, стандартно отклонение, медиана, дисперсия, математическо очакване, разпределение на случайна величина, функция на разпределение, плътност на разпределение.
- Да са запознати задълбочено с еднопроменливата регресия и нейното приложение за калибрирането по сигнал/концентрация.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Компютърна квалиметрия.

Техническо осигуряване на обучението

- Компютърна зала с 10 компютъра, работещи в среда на *Windows* и разполагащи с програмите *Word* и *Excel*.
- 60 909 мас-спектри на органични съединения (безплатно разпространяватa спектрална сбирка на NIST)
- 1000 ИЧ спектри на органични съединения, закупени по предишен проект на колектив от катедрата.
- 900 ИЧ спектри на органични съединения, измерени от дипломанти и колеги от катедрата.
- 200 Раман спектри на органични съединения, измерени от дипломанти и колеги от катедрата.
- Демонстрационна сбирка от 350 ИЧ спектри и софтуер, към апарата VERTEX 70 FT-IR spectrometer (Bruker Optics)

- Демонстрационна сбирка от 246 Раман спектри и софтуер, към Раман спектрометъра RAM II (Bruker Optics).
- Един лиценз на професионалната статистическа програма *Statistica 10* (2010 г.), закупена по предишен проект на колектив от катедрата.
- Три компютърни програми (*BinCalss*, *IRMassClass* и *IRIS*), работещи под Windows и програмирани от лектора, специално за преподаване на методите на хеометрията.
- Компютърна програма под Windows за съставяне и провеждане на изпитни тестове, която е програмирана от лектора.

Съдържание на курса

Курсът включва преподаване на теоретичните основи, предимствата и ограниченията на хеометричните методи за анализ на данни. Теоретичните основи се разглеждат с помощта на разбираема за студентите математика и представляват задълбочаване на знанията на студентите от съответните области на линейната алгебра и химичната информатика. В курса се набляга предимно на рутинните методи за анализ на хеометрични данни: анализ на главните компоненти, кластерен анализ, метод на най-близките съседи, както и се въвежда съвременната концепция (парадигма) за разпределено представяне на знанията, известна като изкуствени невронни мрежи.

Обърнато е внимание на ограниченията на различните хеометрични методи, както и на възможните области на тяхното приложение. Акцентува се и върху интерпретацията резултатите от анализа на данните и нейната връзка с поставената химична задача.

Упражненията имат за цел да дадат практически знания и опит за решаване на въпроси от ежеднезната химическа практика като (1) избор и числено представяне на данните, (2) предварителна обработка на данните, (3) избор на подходящ хеометричен метод, (4) възможност за прилагане на други хеометрични методи, както и сравнение на техните резултати, (5) интерпретация на резултатите и тяхното валидиране.

Практическите занятия включват (1) запознаване с основните понятия на хеометриката – химичен обект и химично събитие, химичен образ, размерности на данните, (2) съставяне на обучаваща, тестваща и валидираща извадки, (3) прилагане на различните хеометрични методи за малки извадки, чрез работа в програмата Excel, (4) прилагане на различните хеометрични методи за средно големи извадки в програмата Statistica, (5) решаване на различни класификационни задачи с реални данни, като интерпретация на ИЧ и мас-спектри, търсене в спектрални библиотеки, анализ на замърсявания на води, оптимизиране на химичен анализ и химичен процес.

Студентите се поощряват да работят по двойки на всеки компютър, където дискусията между тях запълва празнотите в техните теоретични знания, както и всеки от тях да има собствена тетрадка за записки (надписана от тях и подписана от лектора), която могат да използват при колоквиума и изпита по дисциплината. По време на практическите занятия, студентите се запознават с различни справочни пособия, като спектрални атласи и сбирки на перфокарти, референтни книги за свойствата на химичните съединения и компютърни спектрални библиотеки.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции по Хеометрия

Тема	часове
1. Случайна Величина и статистически оценки на параметрите на разпределението. Едномерни данни и многомерни данни в химичния експеримент. Параметрични и непараметрични хеометрични методи. Баесиянова класификация: проблеми при многомерните данни.	2
2. Многомерно пространство на образите и разстояние в него. Химични обекти и събития, многомерни образи. Двоични образи. Пространство на образите. Мерки за разстояние в пространството на образите.	2
3. Класификация по разстоянието до центроидите на извадката. Центроид. Метод на центроидите. Нагледно представяне на метода. Разделяща повърхност.	2
4. Класификация с линейна обучаваща машина. Алгоритъм. Разделяща хиперравнина. Обучение.	2
5. Хеометрични методи – обзор. Структуриране на данните. Класификацията на хеометричните методи. Прилагане на хеометричните методи. За данните и не само за тях. Конструирание на обучаваща, тестваща и валидираща извадки. Скалиране на данните в извадките.	2
6. Кластерен анализ. Метод на единичната, средната и пълната връзка. Многобройните приложения на метода в химията и спектроскопията.	2
7. Приложение на линейната алгебра в хеометриката. Решаване на системи от линейни уравнения, когато броят на неизвестните е по-малък от броя независими уравнения или т.н. линейно параметризиране в науката. Линейна еднопроменлива и многопроменлива регресия: прилики и разлики. Работа със статистически програми.	2
8. Приложение на линейната многопроменлива регресия за изчисляване на топлини на образуване на алкани. Дефиниция на топлина на образуване. Топлини на химични реакции. Изчисляване на стандартните топлини на образуване на алкани с помощта на адитивна схема.	2
9. Многокомпонентен анализ на смеси чрез техните УВ-Вид спектри. Електронни спектри на смес от вещества. Многокомпонентен анализ на смеси от вещества.	2
10. Моделиране на химичния експеримент. Моделиране. Видове фактори. Основни етапи на моделирането. Активен експеримент при две нива на входните фактори.	2
11. Спектрално подобие: използване в спектроскопията. Спектрални признаци. Спектралната крива като вектор и като образ. Сравняване на спектрални криви. Търсене в спектрални библиотеки. Химична структура на библиотечните спектри.	2
12. Метод на най-близките съседи. Класификация на ИЧ и Раман спектри с метода.	2
13. Изкуствени невронни мрежи (ИНМ). ИНМ с право разпространение на сигналите. Обучение на ИНМ.	2
14. Линеен дискриминантен анализ. Анализ на главните компоненти. Сравнение на двата метода.	2
15. Колоквиум.	2
Общ брой часове:	30

Форми на текущ контрол:

I Два колоквиума върху принципите и прилагането на хеометричните методи (активен тест с изчислителни задачи, построяване на дендограми, кластериране и класифициране на тримерни или четиримерни образи). Провеждат се през 12-та и 15-ма седмица от семестъра.

Б/ Упражнения по Хемометрия

тема	часове
1. Упражнение. Случайна Величина и статистически оценки на параметрите на разпределението. - Инструктаж за техническа безопасност за работа с ток и компютри. - Едномерно и многомерно разпределена случайна величина. - Статистическа сигурност, ниво на значимост, интегрални граници, грешки от първи и втори род. Работа със статистически таблици и преглед на статистическите функции в програмата Excel.	2
2. Упражнение. Увод в хемометрията - Химичен обект, химично събитие и изготвяне от тях на химичен образ. - Реални и двоични образи. Пространство на образите и разстояния в него. - Изчисления на разстояния между химични образи – в тетрадката и с програмат Excel. - Разпознаване на цифри с програмата <i>BinCalss</i>. - Класификация на ИЧ и мас-спектри с програмата <i>IRMassClass</i>.	4
3. Упражнение. Класификационни методи - Класификация на ИЧ спектри с метода на центроидите в програмата Excel. - Класификация на ИЧ спектри с метода на линейната обучаваща машина в програмата Excel. - Класификация на мас спектри с метода на центроидите в програмата <i>IRMassClass</i>. - Класификация на мас спектри с метода на линейната обучаваща машина в програмата <i>IRMassClass</i>.	4
4. Упражнение. Кластерен анализ - Кластериране на ИЧ спектри в програмата Excel и ръчно построяване на дендограмата. - Кластериране на същите ИЧ спектри с програмата <i>Statistica</i> и сравнение на резултатите. Интерпретация на резултатите.	2
5. Упражнение. Регресионни методи. - Обобщена (псевдо-) обратна матрица и нейното намиране с програмата <i>Excel</i>. - Изчисляване на адитивна схема за топлини на образуване на алкани.	4
6. Упражнение. Регресионни методи. - Многокомпонентен анализ на три аминокиселини. - Активен експеримент при две нива на входните фактори.	4
7. Упражнение - Колоквиум върху материала от упражнения 2, 3, 4, 5 и 6. - Класификация на ИЧ спектри с изкуствени невронни мрежи	4
8. Упражнение. Метод на най-близките съседи - Търсене в спектрални библиотеки от ИЧ и Раман спектри. - Илюстрация на методите за търсене за идентификация и търсенето по подобие. - Анализ на резултатите от търсенето в библиотеката с помощта на метода на най-близките съседи.	4
9. Упражнение. Други химични приложения на хемометричните методи - Линеен дискриминантен анализ. Класификация на ИЧ и мас-спектри с метода. - Анализ на главните компоненти, приложен към данни от хроматографски анализи и сравнение на резултатите с тези, получени с кластерен анализ.	2
Общ брой часове:	30

В/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да изработят **курсова работа**, състоящата се в класифицирането на 2 ИЧ спектъра с метода на линейната обучаваща машина, чрез програмата Excel. Всеки студент получава по Интернет кратко описание на проблема и Excel-ски файл с данните. Обучаващата извадка е от 10 тримерни спектъра (по три спектрални признака на обект). До десетата седмица студентите изпращат своята работа на лектора по електронната поща. Изработването на курсова работа е задължително и е свързано със заверката на семестъра.

Библиография

<i>Автор</i>	<i>Заглавие</i>	<i>Издателство</i>	<i>Година</i>
Пенчев П.	Хеометрия – курс лекции. Е-ресурс	В Интернет (https://students.uni-plovdiv.net/)	2014
Пенчев П.	Хеометрия – курс упражнения. Е-ресурс	В Интернет (https://students.uni-plovdiv.net/)	2014
Brereton R.G.	Applied Chemometrics for Scientists	John Wiley & Sons, Chichester	2007
Футеков Л., Пенчев П.	Теория на експеримента	Изд. ПУ	1998
Шараф М. А., Иллмэн Л., Ковальски Б.Р.	Хеометрика	Химия, Ленинград	1989
Massart D.L., Vandeginste B.G.M., Deming S.N., Michotte Y., Kaufman L.	Chemometrics: A Textbook	Elsevier, Amsterdam	1988
Пенчев П.	Свитък с помощни материали по Хеометрия. Обновяван всяка година.	Интернет и печатна версия	2006-2012

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, в която са дадени основния принцип на съответния хеометричен метод, графики и друго представяне на данните, както и схематичното описание на някои от алгоритмите. Самата презентация е достъпна за студентите от Интернет страницата на лектора <http://web.uni-plovdiv.bg/plamenpenchev> и <https://students.uni-plovdiv.net/>.

Допълнително в лекциите се извеждат от преподавателя на дъската някои от основните уравнения, за да се покаже на студентите физическия смисъл на разделящите равнини при класификационните хеометрични методи. Също така на лекции се извършват изчисления от преподавателя на разстояния в пространството на образите, както и изваждане и събиране на образи, умножение на образ с число, намиране на среден образ (центроид), умножение на матрици. В хода на лекциите лекторът построява кластерите и дендограмите на кластерния анализ по данни, прожектирани с мултимедийния проектор.

През семестъра са планирани два колоквиума, оценката от които участва във формиране на крайната оценка по дисциплината. На студентите се дават примерни колоквиуми, които са ксерокс-копие от колоквиумите на отличници от предишни години. Всяка година материалът в колоквиумите се променя и осъвременява.

Лекциите са придружени и с практически курс, който се състои от упражнения, провеждани в обзаведената за целта компютърна зала. Упражненията са задължителни. Занятията включват:

- подробен инструктаж за правилата за безопасност в компютърна зала и при работа с компютри – студентите се подписват в специална тетрадка, че са преминали инструктажа
 - решаване на изчислителни задачи с малки по размерност образи в тетрадката и на дъската: изваждане и събиране на образи, умножение на образ число, намиране на среден образ (центроид)
 - работа в програмата Excel с образи при класификацията по центроиди и метода на линейната обучителна машина
 - работа в програмата Excel при изготвяне на адитивни схеми за топлини на образуване и за предсказване на сигналите на протонни ЯМР спектри
 - работа в програмата Excel със УВ-Вид спектри при многокомпонентен анализ на смеси
 - Изчисляване на разстояния между образи в програмата Excel и последващо кластериране в тетрадката по метода на единична връзка
 - работа с Windows програми (програмирани от лектора на курса) за класификация на образи и търсене в библиотеки от ИЧ спектри
 - работа с професионалната програма Statistica при кластериране на ИЧ спектри
- В рамките на курса има планирана самостоятелна курсова работа.

Методи и критерии на оценяване

Изпитването по дисциплината се състои от провеждане на един колоквиум по време на упражненията, един по време на лекциите и краен изпит по време на изпитната сесия.

За колоквиума всеки студент получава лист със задачи, които решава и резултатите се записват в листа със задачи. Студентът има право да използва всички учебни материали, отбелязани в литературата по дисциплината, и единствено своята тетрадка без никакви “хвърчащи” листове. Крайният семестриален изпит се провежда като пасивен тест на компютър. Има изготвени три теста по 12, 12 и 16 въпроса, всеки въпрос в четири варианта, които се избират случайно от компютъра. Всеки въпрос има пет отговора, от които само един е верен. Времето за решаване на даден въпрос от теста се задава от компютъра. При теста могат да се използват записки или други учебни материали.

Оценяване:

Крайната оценка по дисциплината се формира от оценката на колоквиумите, $Ko1$ и $Ko2$, оценката от курсовата работа, KP , и оценката от теста, $Тест$, по формулата:

$$Оценка = Ko1 * 0.20 + Ko2 * 0.20 + KP * 0.10 + Тест * 0.50$$

Всички писмени работи (от колоквиума), тетрадката с присъствията и текущите оценки и всички файлове с резултати от компютърния тест се съхраняват в

продължение на 3 години от датата на провеждане на семестриалния изпит. Изработените от студентите файлове с курсовата работа се качват на Интернет страницата на преподавателя с цел прозрачност на оценяването на студентите.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

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” беше обсъждана учебна програма за дисциплина **„Атомен спектрален анализ“**, включена в учебния план на специалност **Анализ и контрол**. След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие на програмата изготвена от доц. д-р В.Кметов и гл.ас. д-р К. Симитчиев.

Моля, Факултетният съвет да одобри представената учебна програма по дисциплина **„Атомен спектрален анализ“**, включена в учебния план на специалност **Анализ и контрол**.

Прилагам приетата на КС програма и препис-извлечение от протокола на катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.4 от дневния ред беше обсъдена и приета с 9 гласа „за“ учебната програма на дисциплината „*Атомен спектрален анализ*” от учебния план на специалност „*Анализ и контрол*” – 3 курс (5 семестър).

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



П Л О В Д И В С Ж Н И В Е Р С И Т Е Т " П А И С И Й И Л Е Н Д А Р С К И "

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

У Ч Е Б Н А П Р О Г Р А М А

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

АНАЛИЗ И КОНТРОЛ (редовно обучение)

О П И С А Н И Е

Наименование на курса

Атомен спектрален анализ

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

трета

Семестър

V

Брой ECTS кредити

8

Име на лектора

Доц. д-р Веселин Кметов

Учебни резултати за курса

Анотация

Курсът АСА надгражда знанията по Аналитична химия, като разглежда инструменталните методи за елементарен анализ чрез атомна спектроскопия, техните теоретични основи, аналитични характеристики и области на приложения.

Целта на занятията по инструментални методи е студентите:

а) да усвоят общата схема - провокация-отклик на взаимодействието на веществото с енергията, чрез която се реализира качествения и количествен инструментален анализ и се получава информация за състава и строежа на веществото.

б) да добият теоретични и начални практически познания по използване на съвременни инструментални методи като: атомна абсорбция и емисия, масспектрометрия, а също и областите на тяхното приложение.

в) да получат базисни знания, необходими за решаване на практически въпроси от лабораторната аналитична практика, като: определяне на ниски съдържания от елементи, критична обработка и оценка на метрологичните характеристики на получените аналитични данни.

г) да придобият елементарни умения за използване на подходяща техника за пробоподготовка, настройка и работа на съвременни инструментални прибори.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят за всеки от изучените инструментални методи:

- Принципите на получаване на спектрално (аналитично) активната форма.
- На какво се основава качествената характеристика на сигнала за идентифициране на даден аналит (качествен анализ)

- Каква е и как се измерва количествената характеристика на сигнала за определяне на концентрацията (абсолютното количество на анализа) в анализирания проба.
- Практически алгоритми за построяване на калибровки и оценка на приложимостта им.
- Какви са приложените задачи, по които тези методи най-често се използват в рутинните изпитвателни лаборатории.

2. *Ще могат:*

- Да разчитат инструкции за работа с аналитични инструменти и да ги прилагат при работа с тях.
- Да реализират готови методики, като приготвят стандартни разтвори и построяват калибрационни (регресионни) прави и определят концентрация на единични или на група от анализи в неизвестна проба.
- Да оценяват критично измерените сигнали и изчислените резултати, като представят с нужната метрологична компетентност данните от проведените анализи.

Начин на преподаване

Аудиторно: 105 ч.

- Лекции (45 часа),
- Лабораторни упражнения (60 часа)

Извънаудиторно: 135 ч

- Самостоятелна подготовка
- Обработка на резултати
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Изисква се студентите да са изучавали курсовете по: ***Основи на химията, Неорганична химия, Подбор, съхранение и подготовка на проби за анализ, Аналитична химия I и II част; Статистика и метрология в химията.***

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да познават основните начини за изразяване на концентрацията в разтвори и смеси, процедури на разтваряне, разреждане и изчисления на фактори на разреждане.
- Да са усвоили общоприетите термини и базови постановки на химичната метрология.

- Да са натрупали умения за работа в аналитична лаборатория. Коректно боравене с мерителни съдове, аналитични везни, пипети, референтни материали, киселини и други реагенти.
- Да познават строежа на атома, електронни орбитали в атоми, символи на терма.
- Да имат основни умения за работа в химична лаборатория: да познават и да работят със стандартната лабораторна екипировка – колби, цилиндри, чаши, нагревателни уреди, центрофуги и ексикатори

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Компютърна квалитетна и Съвременни хроматографски методи, Univariate calibration in analytical chemistry

Техническо осигуряване на обучението

- Катедрата е оборудвана със съвременна апаратура за атомна спектрометрия – FAAS Perkin Elmer 4000, ETAAS Perkin Elmer Zeeman 5100, ICP-OES Thermo iCAP 6300, ICP-MS Agilen 7700, MP-AES Agilent 4200.
- Изградена е и се поддържа лаборатория с вентилирана камина за пробоподготовка снабдена с керамични термични плочи и две системи за микровълново подпомогната киселинна минерализация под налягане – CEM и Milestone Ethos ONE .
- Осигурени са необходимите аналитични везни (до 0,0001 g); изходни фиксали; пипети, центрофуга; клатачна машина и вортекс хомогенизатор; реактиви за количествен анализ с клас “химически чисти за анализ “
- На разположение на студентите са 6 бр. компютърни системи и офис софтуер за обработка на аналитичната информация и изготвяне на анализни протоколи.

Съдържание на курса

Курсът по АСА разглежда най-популярните методи на атомната спектрометрия пламъкова атомно-емисионна спектрометрия (FAAS), атомно-абсорбционна спектрометрия с пламъков (FAAS) и електротермичен атомизатор (ETAAS), Оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма – (ICP-OES) и атомноемисионна спектрометрия с микровълнова плазма (MP-AES), както и мас спектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS).

Упражненията с инструменталната апаратура са в практически ориентирани. Студентите работят на групи по трима, като изготвят калибрантите и разработват пробите за анализ, а самите инструментални измервания се извършват с участието на

студентите под ръководството на асистента, водещ упражнението. Подбрани са подходящи за онагледяване практически задачи, отразяващи често използвани аналитични изпитвания – анализ на води – питейни, природни и отпадни, вино, почва, мляко, витамини.

Практическите занятия включват обработване, критичен анализ и представяне на резултатите от проведените анализи.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Атомен спектрален анализ

1. Инструменталния анализ като дял от аналитичната химия основан на взаимодействието вещество-енергия. Видове инструментални методи. Значение на ИМА в съвременната аналитична практика.	3 часа
2. Основи на спектроскопията. Електромагнитно лъчение, природа и характеристики, области на електромагнитния спектър. Взаимодействие на ЕМЛ с веществото, връзка със спектралните методи. Качествен и количествен спектрален анализ.	3 часа
3. Атомни спектри. Спектрални термове. Пламъков атомно-емисионен анализ. Вероятност за преход, подборни правила, интензитет. Населеност на енергетичните нива. Ширина и форма на спектралните линии и ивици.	3 часа
4. Атомно-абсорбционна спектроскопия - принцип на метода. Теоретични основи – Закон на Кирхов, правила на Уолш, Закон на Буге-Ламберт и Беер за светлинната абсорбция.	3 часа
5. Пламъков атомно-абсорбционен анализ. Инструментариум - източници на възбуждане и атомизация; пламъци, пулверизатори и камери, оптични схеми. Аналитични характеристики и приложение на FAAS.	3 часа
6. Количествено определяне в спектроскопията: методика на калибриране, работна област, метод на стандартната добавка. Характеристична концентрация, линейност и работна област на калибровачната функция.	3 часа
7. Неспектрални пречещи влияния при атомно-абсорбционния анализ. Транспортни пречения, високо съдържание на матрицата, химично пречене, йонизационно пречене. Матричен ефект. Начини за отстраняване на матричните пречения.	3 часа
8. Електротермичен атомно-абсорбционен анализ. Механизъм на въвеждане и атомизация в графитна кювета. ETAAS - аналитични характеристики и приложение. Температурни програми.	3 часа
9. Спектрални пречения. Съвпадение на линии и близко разположени линии. Неселективна абсорбция. Деутериев, Зееманов, Симт-Хифти коректори на неселективна абсорбция.	3 часа
10. Атомно-емисионен спектрален анализ. Източници за възбуждане - видове. Характеристики на искровата спектрометрия. Индуктивно свързана плазма като източник за възбуждане на атомни и йонни спектрални линии. Дисперсия на лъчението, регистрация. Блок схема на емисионен спектрометър. Видове оптични системи - полихроматор и монохроматор. Аналитични характеристики и приложение на ICP-OES.	3 часа

11. Атомно-емисионен спектрален анализ с микровълнова плазма. Предимства и ограничения на метода. Приложения на MP-AES.	3 часа
12. Методи на хидридна генерация в комбинация с инструментален анализ за атомна спектрометрия. Метод на студените пари за определяне на Hg.	3 часа
13. Масспектрометър с индуктивно свързана плазма. Блок схема – плазма, интерфейс, йонна оптика, квадруполен мас филтър, йонен детектор. Принцип на метода – качествена и количествена характеристика на мас спектъра. Аналитични характеристики. Полуколичествено и количествено определяне. Възможност за изотопен анализ и определяне на изотопни отношения.	3 часа
14. Масспектрометър с индуктивно свързана плазма. Изобарни пречения, колизионни и реакционни клетки и тяхното приложение за отстраняване на полиатомни пречения.	3 часа
15. Алтернативни методи за въвеждане при АСА: електротермично изпарение, лазерна аблация, инжектиране в поток, директно впръскване. Критичен анализ на областите на приложение.	3 часа

Форми на текущ контрол:

I Колоквиум, съответстващ на 50% от материала по дисциплината (комбиниран пасивен тест и активни въпроси плюс две изчислителни задачи), относителна тежест 15% към крайната оценка

Провежда се през 7-ма седмица от семестъра.

II Колоквиум, съответстващ на 75% от материала по дисциплината (активен тест с изчислителни задачи).

Провежда се през 13-та седмица от семестъра, относителна тежест 15% към крайната оценка.

Води се папка със списък на студентите и отчитане на присъствие на лекции и упражнения. В началото на всяка лекция и упражнение се провежда събеседване със студентите и се нанасят бонуси по 0,1 т за активно участие и усвояване на материала.

Б/ Упражнения по Атомен спектрален анализ

тема	часове
<i>I Занятие - Запознаване с обема и целите на курса по Атомен Спектрален Анализ.</i> 1. Изисквания към курса АСА, Инструктаж ТБ. 2. Изчисляване на енергии на квантови преходи; честоти и дължини на вълната. 3. Атомни преходи. Подборни правила. Изчисляване на населеност на нивата.	4
<i>II Занятие - Атомни спектри и спектрометри. Спектрални величини и връзки между тях- ЗАДАЧИ</i> 1. Безразмерни величини за изразяване на следови съдържания - %;‰; ppm; ppb; ppt;	4

ppf; 2. Изчисляване на концентрации в р-ри и твърди проби.	
III Занятие - Пламъкова атомна емисия FAES 1. Качествена и количествена характеристика в спектроскопията - търсене на линии на Na, Ca, K; 2. Определяне на Na в трапезни води.	4
IV Занятие - Определяне на Na, K, Ca в инфузионен разтвор Рингер чрез FAES.	4
V Занятие - Пламъкова атомно-абсорбционна спектрометрия FAAS - определяне на Fe в бяло вино. 1. Условия на Уолш. Източници за възбуждане в AAS - кухокатодни и безелектродни лампи. 2. Оптични схеми - еднолъчеви и двулъчеви, монохроматор и детектор. Закон на Буге-Ламберт-Бееер 3. Приготвяне на работни стандартни р-ри, работа с микропипети. 4. Практическа задача – определяне на Fe в бяло вино._	4
VI Занятие - Пламъково атомно-абсорбционно определяне на обменния Mg в почви – I част. 1. Калибриране - стандартна права, регресионно уравнение, работна област. Чувствителност, характеристична концентрация, възпроизводимост и граница на определяне на FAAS. 2. Пречения в AAS - неспектрални пречения. Методи за отчитане и коригиране. Матричен ефект 3. Метод на стандартната добавка 4. Практическа задача - извличане на подвижния Mg в почви._	4
VII Занятие - Пламъково атомно-абсорбционно определяне на обменния Mg в почви – II част. 1. Измервания на FAAS и обработка на регистрираните сигнали. 2. Колоквиум I.	4
VIII Занятие - Електротермична атомна абсорбция (ETAAS). Анализ на разтвори. 1. Разбор на Колоквиум I. 2. Предимства и недостатъци на пламъковата AAS - алтернативни атомизатори. 3. Графитна кювета на Лвов. Температурни програми. Криви на Велц. 4. Практическа задача - определяне на Pb в прясно мляко._	4
IX Занятие - Електротермична атомна абсорбция (ETAAS). Анализ на суспензии и твърди проби 1. Практическа задача - определяне на Pb в прахообразни сенки за очи и човешка коса.	4

X Занятие - Емисионен спектрален анализ с плазмени източници – атомно-емисионна спектрометрия с микровълново генерирана плазма (MP-AES) 1. Блок схема на емисионен спектрометър с микровълнова плазма; спектрално активна форма в MP-AES; пробовъвеждане; спектрален обхват и разделителна способност. 2. Видове пречения в емисионната спектрометрия с плазмени източници и начини за отстраняване. Корекция на адитивно и мултипликативно пречене. 3. Практическа задача – определяне на химични елементи като активни вещества в евфевресцентни витамини с микро-минерали.	4
XI Занятие - Метод на студентите пари и хидридна генерация в атомната спектрометрия. 1. Практическа задача – определяне на тоталното съдържание на арсен в почва чрез хидридна генерация в комбинация с атомно-емисионна спектрометрия с микровълново генерирана плазма (HG-MP-AES)	4
XII Занятие - Емисионен спектрален анализ – оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP- OES) – I част 1. Блок схема на емисионен спектрометър с ICP: плазмен източник за възбуждане - генериране и зони; спектрално активна форма в ICP-OES; пробовъвеждане; оптични системи полихроматор и монохроматор, спектрален обхват и разделителна способност 2. Калибрация и рекалибрация. Аналитична програма. Критерии за избор на аналитична линия. Калибрационна крива и ВЕС концентрация в ICP-OES. 3. Количествен многоелементен анализ на отпадни води чрез метода на вътрешния стандарт – инструментално регистриране на сигналите за проби и стандарти.	4
XIII Занятие - Емисионен спектрален анализ – оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP- OES) – II част 1. Обработване на регистрираните сигнали в предходното упражнение. 2. Колоквиум II	4
XIV Занятие - Масспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS). 1. Разбор на Колоквиум II. 2. Основни блокове и принцип на работа на ICP-MS спектрометър – йонизационен източник; интерфейс; масфилтър; детектор. 3. Изотопен анализ - изобарни и полиатомни пречения, подходи за корекция 4. Количествен анализ с ICP-MS. Калибрация; дрейф на чувствителността; матрични пречения 5. Демонстрация - ICP-MS полуколичествен анализ;	8
Общ брой часове:	45

В/ Самостоятелна подготовка:

Студентите следва да се подготвят от предоставените им свитъци и литература като текущото ниво на подготовка се проверява в началото на всеки лекционен курс и

лабораторно упражнение. Разработени са примерни изчислителни задачи, касаещи приготвяне на пробни и стандартни разтвори, регресионни уравнения за калибриране, статистическа обработка на резултатите от проведените анализи. Студентите следва да упражняват самостоятелно в извън аудиторната заетост изчислителните модели и тълкуването на получената информация.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
В. Кметов	Свитък лекционен курс - MS PowerPoint - разпечатка и електронна версия http://web.uni-plovdiv.bg/kmetov/Education/EDU-BG.htm		2016
Р. Борисова	Основи на химичния анализ	Водолей	2009
R. Kellner et al.,	Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science, 2nd ed	John Wiley & Sons	2004
Крисчън Г., О'Рейли Д.	Инструментален Анализ	Изд. СУ	1998
Андреев Г.	Молекулна Спектроскопия	Изд. ПУ	2010
Douglas A. Skoog, F. James Holler, Stanley R. Crouch	Principles of Instrumental Analysis	Thomson Brooks/Cole	2007
Хавезов И., Цалев Д.	Атомно-абсорбционен анализ	София, Изд. НИ	1980
James W. Robinson	Undergraduate Instrumental Analysis	M. Dekker	1995

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Курсът е разработен като мултимедийни презентации от 15 модула всеки по три часа, за всяка учебна седмица. Предварително студентите имат възможност да копират свитъка със слайдовете от лекциите или да го свалят като Acrobat – pdf файл от интернет. <http://web.uni-plovdiv.bg/kmetov/Education/EDU-BG.htm>

Студентите се поощряват също да изготвят и представят презентационни материали, като за това им се записват „бонуси” – по 0,1, които се прибавят към крайната оценка. Провеждат се два колоквиума през семестъра (през 7-ма и 13-та седмица), оценките от които участват във формирането на крайната оценка по дисциплината.

Упражненията по ИМА са задължителни и включват практически курс за атомна спектроскопия по 4 часа всяка седмица. Разработени са демонстрационни упражнения, които се реализират със съответната инструментална екипировка. По време на лабораторните упражнения студентите работят по групи като разработват пробите за анализ, калибрационните стандарти и обработват получената след инструменталното измерване информация. От студентите се изисква да носят отговорност за предадените

результати и изготвените анализни протоколи. При необходимост студентите доработват самостоятелно получените данни или търсят консултации с лектора на курса и асистентите, водещи упражненията.

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма са включени два колоквиума под формата на активен тест с изчислителни задачи. Текущият контрол от лекции и упражнения, както и бонуси от самостоятелната работа на студента също има принос към крайната оценка. Дисциплината приключва с изпит - пасивен тест (40 въпроса), включващ всички теми от учебната програма. Отговорите от теста носят положителни точки, ако са верни и отрицателни точки, ако са неверни, като броя точки е съобразен със сложността на въпроса и степента на грешка. Разработен е компютърен алгоритъм на EXCEL за бързо и несубективно оценяване на теста. Студентите са предварително запознати със скалата за оценяване и могат да проверят резултатите си от теста, както и да ги сравнят с тези на колегите си. Оценките от колоквиумите, натрупаните бонуси, точките и поставената оценка се качват на страницата на преподавателя в интернет и са достъпни за всички заинтересувани.

Крайната оценка по дисциплината се формира от 4 компонента: резултати от текущ контрол и бонуси от самостоятелна работа; оценките от двата семестриални колоквиума и резултатите от крайния тестови изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

15% от оценката на I колоквиум + 15% от оценката на II колоквиум + 70 % от оценката от семестриалния тест + $N \cdot 0.1$ (броя бонуси)

Студентите имат право на възражение за резултатите от писмените си работи, както и да се откажат от поставената оценка и да се явят на следваща дата за изпит.

Всички писмени работи от колоквиуми и изпитни тестове се съхраняват в продължение на 1 години от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български (има възможност и за преподаване на Английски език)

Изготвил описанието

Доц. д-р Веселин 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 “Аналитична химия и компютърна химия” беше обсъдено предложение за **програма за изпит по специалността от индивидуалния план на Мина Тенева Кирякова**, редовен докторант към Катедра Аналитична химия по научна специалност Аналитична химия, с тема на дисертационния труд: „**Подобряване на качеството на аналитичните резултати чрез изследване на бюджета на неопределеност**”. След подробно обсъждане, катедреният съвет единодушно прие програмата, изготвена от научния ръководител на докторанта доц. д-р Веселин Кметов.

Моля, Факултетният съвет да одобри **предложената програма за изпит по специалността на докторант Мина Кирякова**.

Прилагам гласуваната от КС на КАХКХ програма и препис-извлечение от заседанието на катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ

доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.7 от дневния ред беше обсъдена и приета с 9 гласа „за”
програма за изпит по специалността от индивидуалния план на докторант
Мина Тенева Кирякова, редовен докторант към катедрата.

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



ПРОГРАМА

за

ИЗПИТ ПО СПЕЦИАЛНОСТТА ОТ ИНДИВИДУАЛНИЯ ПЛАН

на

Мина Кирякова –

**докторант в Катедра Аналитична химия и компютърна химия
по научна специалност Аналитична химия**

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

1. ПРЕДСТАВЯНЕ НА РЕЗУЛТАТИ ОТ ИЗМЕРВАНЕ. Статистически характеристики на дисперсията на резултатите - стандартно отклонение, доверителен интервал, неопределеност.
2. БЮДЖЕТ НА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТ. Влияещи величини върху аналитичния резултат. Fishbone диаграма. Стандартна, комбинирана и разширена неопределеност. Модели за конструиране на бюджета на неопределеност.
3. МОДЕЛ НА КРАГТЕН за изчисляване на комбинираната неопределеност и оценка на приноса на входните величини. Идентифициране на значимите фактори и тяхното управление.
4. ОЦЕНКА НА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТТА на аналитичните резултати чрез прилагане на метода Monte-Carlo. Сравняване с подхода в Guide to the expression of Uncertainty Measurement (GUM).
5. МЕТРОЛОГИЧНА ПРОСЛЕДИМОСТ - система за осигуряване на метрологична проследимост. Първични и вторични еталони. Сертифицирани референтни материали.
6. ПРОЦЕДУРИ НА КАЛИБРИРАНЕ - Регресионни модели (претеглена и не претеглена регресия). Коефициент на корелация, коефициент на детерминираност и оценки на параметрите на регресия. Методи на външна калибровка, Метод на стандартната добавка. Метод на вътрешния стандарт.
7. НЕОПРЕДЕЛЕНОСТ ПРИ КАЛИБРИРАНЕ – модели за оценка на приноса на процедурата на калибриране при конструиране на бюджета на неопределеност.
8. ПРЕЦИЗНОСТ НА АНАЛИТИЧНИТЕ ИЗМЕРВАНИЯ – оценки на повторяемост, междина прецизност и възпроизводимост на резултатите. Емпирични модели на Хорвиц за оценка на съответствието на прецизността на аналитичните процедури с изискванията към методите за изпитване.
9. ЦЕЛЕВА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТ – оценка на качеството на аналитичните резултати при изпълнение на регламенти. Връзка на целевата неопределеност с границите на откриване на метода.

10. ВАЛИДИРАНЕ НА ПРОЦЕДУРАТА НА АНАЛИЗ. Вътрешно лабораторно валидиране. Сравняване на аналитични резултати. Контрол на качеството.
11. МЕЖДУЛАБОРАТОРНИ СРАВНЕНИЯ И ТЕСТОВЕ ЗА КОМПЕТЕНТНОСТ - оценка на изпълнението на резултати от МЛС.
12. НЕОПРЕДЕЛЕНOST ПРИ ВЗЕМАНЕ НА РЕШЕНИЯ - дефиниране на зони на приемане и на толеранс на аналитичните резултати при оценка на съответствието.
13. МЕТОДИ ЗА РАЗДЕЛЯНЕ И КОНЦЕНТРИРАНЕ. Класификация и метрики за количествено охарактеризиране на методите за разделяне - аналитичен добив, фактор на разделяне. Оценка на неопределеността при процедури на разделяне и концентриране.
14. НЕОПРЕДЕЛЕНOST ПРИ ПРОБОНАБИРАНЕ. Оценка на хомогенността на обектите за анализ. Представителна проба, методи за охарактеризиране.
15. ТВЪРДОФАЗНА ЕКСТРАКЦИЯ. Принципи и характеристики на твърдофазната екстракция. Видове колекторни фази. Количествено охарактеризиране на системи за твърдофазна екстракция - фактор на задържане, капацитет на колекторната фаза. Оценка на неопределеността при процедури на твърдофазна екстракция.
16. ВИСОКОЕФЕКТИВНА ТЕЧНА ХРОМАТОГРАФИЯ (ВЕТХ). Принципи, начини на работа. Уравнение за количествено описание на задържането. Оценка на влияещи величини и приноси към бюджета на неопределеността при хроматографските методи за анализ.
17. АТОМНО-ЕМИСИОННА СПЕКТРОСКОПИЯ. Оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма ICP-OES. принцип и възможности. Оценка на влияещи величини и приноси към бюджета на неопределеността при инструменталния анализ чрез ICP-OES.
18. ICP-МАССПЕКТРОМЕТРИЯ принцип и възможности. Оценка на влияещи величини и приноси към бюджета на неопределеността при инструменталния анализ чрез ICP-MS.

Научен ръководител:

/ доц. д-р Веселин Кметов /

Ръководител КАХКХ:

доц.д-р Виолета Стефанова

Литература

1. Mitra S (ed) (2003), Sample Preparation Techniques in Analytical Chemistry, vol 162. CHEMICAL ANALYSIS. John Wiley & Sons, Inc, New Jersey
2. Hill SJ (ed) (2007), Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications. Analytical Chemistry, vol 6, 2nd edn. Blackwell Publishing Ltd, Oxford, UK
3. Vanhaecke F, Degryse P (eds) (2012), Isotopic Analysis. Fundamentals and Applications Using ICP-MS. Wiley-VCH Verlag & Co. KGaA, Weinheim, Germany
4. Barwick V.J, Prichard E. (Eds), Eurachem Guide: Terminology in Analytical Measurement – Introduction to VIM 3 (2011), ISBN 978-0-948926-29-7.
5. Eurachem/CITAC(2012) Guide Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement ISBN 978-0-948926-30-3
6. Guide, Citac First Edition, (2007), Measurement uncertainty arising from sampling
7. Guide, Citac First Edition, (2007), Use of uncertainty information in compliance assessment
8. Ea-4 /16 g: 2003 EA guidelines on the expression of uncertainty in quantitative testing purpose

9. European Commission, (2007), COMMISSION REGULATION (EC) No 333/2007
10. JCGM 104:2009, (2009), Evaluation of measurement data— An introduction to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” and related documents
11. JCGM 102: 2011,(2011), Evaluation of measurement data– Supplement 2 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” – Extension to any number of output quantities
12. Eurachem Guide,(2014), The Fitness for Purpose of Analytical Methods– A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics

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” беше обсъдено предложение за **конспект за докторант по направление 4.2. Химически науки, научна специалност Теоретична химия**. Предложението е изготвено от водещите специалисти в акредитираната докторантска програма - проф. дхн В.Делчев и доц. Д-р Н.Кочев.

Членовете на катедрения съвет обсъдиха по същество съдържанието на предложената програма и след направените разяснения и приетите от авторите предложения за корекции, подкрепиха с гласуване предложената програма.

Моля, Факултетният съвет да одобри предложената програма за **конспект за докторант по научна специалност Теоретична химия**.

Прилагам гласуваният от КС на КАХКХ конспект за докторант по Теоретична химия и препис-извлечение от заседанието катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ
доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.6 от дневния ред беше обсъден и приет с 9 гласа „за”
конспект за конкурсен изпит за докторант по направление 4.2.Химически
науки, научна специалност *Теоретична химия*.

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



КОНСПЕКТ

за конкурсен изпит за докторантура по ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ

1. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ I. Топологични представяния. Матрица на съседство и матрица на топологичните разстояния. Таблица на свързаност. Линейна нотация SMILES.
2. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ II. Геометрично (3D) структурно представяне. Декартови координати. Вътрешни координати. Z-матрица. Молекулни повърхности. Повърхности на Ван дер Ваалс и Конъли.
3. ПРЕДСТАВЯНЕ НА СТРУКТУРНА ИНФОРМАЦИЯ III. Позиционна изомерия. Стерео изомерия. Тавтомерия.
4. П-ЕЛЕКТРОННО ПРИБЛИЖЕНИЕ. Метод на Хюкел. Молекули на етен, бутадиен и бензен. Енергия на делокализация. Енергия на $\pi \rightarrow \pi^*$ електронния преход в бензена.
5. ТОПОЛОГИЧНИ СВОЙСТВА НА СПРЕГНАТИТЕ СИСТЕМИ. Моно- и полициклични спрегнати системи. Правило на Хюкел за ароматност.
6. МЕТОД НА МОЛЕКУЛНАТА МЕХАНИКА. Валентно силово поле. Потенциални функции в молекулната механика. Минимизация на енергията и оптимизация на геометрията. Конформери. Конформации. Седлови точки. Методи за търсене на конформери.
7. МОЛЕКУЛНИ ДЕСКРИПТОРИ. Класификация на молекулните дескриптори. Конституционни дескриптори. Топологични дескриптори. Топологични индекси. Геометрични дескриптори. Автокорелационни дескриптори. Дескриптори базирани на информационното съдържание
8. СТАТИСТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ. Многопроменлива линейна регресия. Статистическа оценка на параметрите на регресията. Методи за валидиране на модели. Статистически характеристики за валидиране на модел.
9. СТАТИСТИЧЕСКА ТЕРМОДИНАМИКА. Статистическа сума. Молекулна сума на състоянието – постъпателна, ротационна, вибрационна, електронна. Изчисляване на термодинамични функции по статистически суми.
10. УРАВНЕНИЕ НА ШРЪОДИНГЕР ЗА ВОДОРОДНИЯ АТОМ. Решения на вълновото уравнение за атома на водорода. Водородоподобни атомни орбитали. Квантови числа. Спин. Спин-орбитала.
11. МНОГОЕЛЕКТРОННИ АТОМИ. Векторен модел на атома. Принцип на изграждане на електронните конфигурации на многоелектронни атоми. Атомни термове.
12. ЕЛЕМЕНТИ НА МОЛЕКУЛНАТА СИМЕТРИЯ. Видове конфигурации. Елементи и операции на симетрия. Точкови групи на симетрия.
13. НЕРАЗЛОЖИМИ И РАЗЛОЖИМИ ПРЕДСТАВЯНИЯ. Матрично представяне на операциите на симетрия чрез преобразуване на координатите на атомите. Характер на преобразуване. Извеждане на неразложимите представяния на точковата група C_{2v} .

14. ТЕОРИЯ НА ВАЛЕНТНИТЕ ВРЪЗКИ. Приближение на Борн – Опенхаймер. Електронен строеж на водородната молекула. Квантовохимичен резонанс. Хибридизация на атомни орбитали.
15. МЕТОД НА МОЛЕКУЛНИТЕ ОРБИТАЛИ. Основни положения. Електронен строеж на катиона на водородната молекула (приложение на вариационния принцип). Припокриване на АО – интеграл на припокриване. Видове химични връзки.

Литература

1. J. Gasteiger & T. Engel Ed., Chemoinformatics: a textbook, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2003.
2. J. Gasteiger Ed., Handbook of Chemoinformatics: From Data To Knowledge Volumes 1, 2, 3 and 4, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., 2003.
3. R. Todeschini and V. Consonni, Handbook of Molecular Descriptors; WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., 2000
4. D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman. Chemometrics: a textbook. Elsevier, 1988.
5. Andrew R. Leach, V.J. Gillet, An Introduction to Chemoinformatics, Springer, 2007.
6. R.Todeschini, V.Consonni, Molecular Descriptors for Chemoinformatics, Volumes I&II, Wiley-VCH, 2010.
7. K.Varmuza, P.Filzmoser, Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics, CRC Press Taylor & Francis Group, 2008
8. В. Делчев, Квантова химия, ПУ, 2016.
9. В. Делчев, Квантовохимични методи, ПУ, 2010.
10. Г. Николов, Основи на квантовата химия и строеж на веществото, ПУ, 1996.
11. Н. Тютюлков, Теория на молекулните орбити, Наука и изкуство, София, 1970.
12. Н. Тютюлков, Квантова химия, Наука и изкуство, София, 1978.
13. Дж. Марпел, С. Кеттл, Дж. Теддер, Теория валентности, Мир, Москва, 1968.
14. W. Moor, Physical Chemistry, Longman, London, 1972.

Изготвили:

(доц. д-р Н. Кочев)

(проф. дхн. В. Делчев)

Ръководител катедра АХКХ:

(доц. д-р В. Стефанова)

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” беше обсъдено предложение за конспект за заемане на академичната длъжност *главен асистент по Аналитична химия*.

Членовете на катедрения съвет обсъдиха детайлно съдържанието на конспекта, предложиха корекции по някои от темите, залегнали в конспекта и актуализираха списъка с препоръчаната литература. След въвеждане на направените корекции, членовете на катедрения съвет подкрепиха с единодушно гласуване конспекта.

Моля, Факултетният съвет да одобри предложеният конспект за заемане на академичната длъжност *главен асистент по Аналитична химия*.

Прилагам гласуваният от КС на КАХКХ конспект и препис-извлечение от протокола на заседанието на катедрения съвет.

9.11.2016

Ръководител КАХКХ
доц.д-р Виолета Стефанова

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 09.11.2016

ПРОТОКОЛ № 13

На 09.11.2016 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 9

Присъстват 9

Необходим брой за положителен избор 5

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови въпроси
3. Разни

По точка 1.5 от дневния ред беше обсъден и приет с 9 гласа „за”
конспект за заемане на академична длъжност „главен асистент” по
Аналитична химия.

09.11.2016

Протоколчик:

/П. Балабанова/



К О Н С П Е К Т

ЗА КОНКУРСЕН ИЗПИТ ЗА ЗАЕМАНЕ НА АКАДЕМИЧНАТА ДЛЪЖНОСТ ГЛАВЕН АСИСТЕНТ ПО АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ

ноември 2016

1. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ. Закон за действие на масите. Количествена характеристика на равновесни процеси. Състояние на веществата в разтвори. Активност и йонна сила на разтвора. Фактори влияещи върху равновесието - термодинамични, концентрационни и условни равновесни константи.
2. КИСЕЛИННО - ОСНОВНИ РАВНОВЕСИЯ. Класически и съвременни представи за равновесията във водни и неводни разтвори. Протолитна теория. Протолитни константи. Сила на протолитите и фактори, от които тя зависи. Буферни разтвори. Буферен капацитет.
3. КОМПЛЕКСООБРАЗОВАТЕЛНИ ПРОЦЕСИ. Количествена характеристика на комплексобразователните равновесия. Видове стабилитетни константи α -коефициенти. Фактори, от които зависи стабилността на комплексите.
4. ПРОЦЕСИ НА УТАЯВАНЕ И РАЗТВАРЯНЕ. Количествено характеризиране на хетерогенни равновесия утайка-разтвор. Връзка между произведение на разтворимост и разтворимост. Фактори, влияещи върху разтворимостта на утайките. Видове произведение на разтворимост.
5. ОКИСЛИТЕЛНО-РЕДУКЦИОННИ ПРОЦЕСИ. Електрод, електроден потенциал, обратими и необратими системи. Стандартни, реални и условни окислително-редукционни потенциали. Уравнение на Нернст. Определяне посоката на окислително-редукционните процеси.
6. МЕТОДИ ЗА РАЗДЕЛЯНЕ, КОНЦЕНТРИРАНЕ И МАСКИРАНЕ. Принципи, разпределителни равновесия и приложение на: дестилация, съутаяване, екстракция, хроматография. Маскиране на пречещи компоненти.
7. ГРАВИМЕТРИЧЕН (ТЕГЛОВЕН) АНАЛИЗ. Утаечна и тегловна форма. Механизъм на утаяване. Причини за замърсяване на утайките: адсорбция, оклюзия, следващо утаяване. Условия за получаване на чисти утайки.
8. ТИТРИМЕТРИЧЕН (ОБЕМЕН) АНАЛИЗ. Изисквания към химическите реакции, подходящи за обемен анализ. Класификация на титриметричните методи. Криви на титруване, еквивалентна и крайна точка, индикатори.
9. КИСЕЛИННО -ОСНОВНО ТИТРУВАНЕ (ПРОТОНОМЕТРИЯ). Титранти и титроустановители. Криви на титруване. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие, индикаторен експонент и интервал на превръщане. Избор на индикатор. Предимства и ограничения на метода.
10. УТАЕЧНО ТИТРУВАНЕ. Криви на титруване. Индикатори. Аргентометрия. Халогенометрия. Тиоцианометрия. Предимства и ограничения на метода.
11. КОМПЛЕКСОМЕТРИЧНО ТИТРУВАНЕ. Комплексонометрия - метални комплексонати - състав, структура и стабилност. Криви на титруване.

- Металохромни индикатори, избор на индикатор. Предимства и ограничения на метода.
12. РЕДОКСИМЕТРИЯ. Титранти и титроустановители. Криви на титруване. Особености на перманганометрия и йодометрия. Предимства и ограничения на метода.
 13. ПОТЕНЦИОМЕТРИЯ. Принцип на метода. Индикаторни и сравнителни електроди. Принцип на потенциометрично титруване, предимства и ограничения. Директна потенциометрия: рН-метрия.
 14. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НА ЕЛЕКТРОМАГНИТНОТО ЛЪЧЕНИЕ С ВЕЩЕСТВАТА. Енергетични преходи в атоми и молекули. Атомни и молекулни спектри. Качествен и количествен аспект на спектралния анализ. Закон на Буге-Ламберт-Беер.
 15. АТОМНА СПЕКТРОСКОПИЯ. Атомно абсорбционна спектроскопия: условия на Уолш, атомизатори (пламъков и електротермичен), източници за възбуждане, аналитични характеристики.
 16. ПЛАЗМЕНА СПЕКТРОСКОПИЯ - Емисионна спектроскопия: източници за възбуждане, оптични системи (поли- и монохроматори). Оптико-емисионна спектроскопия с индуктивно свързана плазма – ICP-OES, аналитични характеристики. ICP-масспектрометрия принцип и аналитични характеристики.
 17. ИНФРАЧЕРВЕНА СПЕКТРОСКОПИЯ. Трептене на двуатомна молекула. Хармоничен и анхармоничен осцилатор. Трептения на многоатомни молекули - видове, брой. Характеристични трептения. Фактори, влияещи върху характеристичните честоти. Изотопен, индукционен и мезомерен ефекти.
 18. СПЕКТРОФОТОМЕТРИЯ. Електронни преходи в молекули. Интензитет на преходите. Видове електронни преходи. Директна спектрофотометрия и спектрофотометрично титруване –принципи и аналитични характеристики.
 19. ЯДРЕН МАГНИТЕН РЕЗОНАНС. Магнитни свойства на атомното ядро. Енергетични нива на атомното ядро в магнитно поле. Химично отместване. Спин-спиново взаимодействие. Структура на ядрено-магнитния спектър.
 20. КАЛИБРИРАНЕ В СПЕКТРОСКОПИЯТА. Стандартни разтвори. Метод на калибрационната крива. Метод на стандартната добавка. Метод на вътрешния стандарт. Линеиност и работна област.
 21. ПРЕДСТАВЯНЕ НА РЕЗУЛТАТИ ОТ ИЗМЕРВАНЕ. Статистически характеристики на дисперсията на резултатите - стандартно отклонение, доверителен интервал неопределеност. Бюджет на неопределеността. Метрологична проследимост.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Борисова, Основи на химичния анализ, Водолей, София, 2009
2. Пеков Г. , Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Климент Охридски“, 2008
3. П. Бончев, Увод в аналитичната химия, НИ,София, 1979.

4. О. Будевски, Основи на аналитичната химия, НИ, София, 1979
5. С. Александров, Аналитична химия, Изд. СУ, София, 1991
6. R. Kellner, Analytical Chemistry, Willey- VCH, 2004
7. J. Dean, Analytical Chemistry Handbook, McGraw-Hill, 1995
8. D. Harvey, Modern Analytical Chemistry, McGraw Hill, 2000
9. Б. Карадаков и съавтори, Ръководство за упражнения по аналитична химия и физични методи в аналитичната химия, Изд. Техника, София, 1985
10. J.N. Miller, J.C. Miller, Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th edition, Pearson Education Limited, 2010
11. Г. Андреев, Молекулна Спектроскопия, Изд. ПУ, Пловдив, 2012
12. Д. Цалев, И. Хавезов, Атомно абсорбционен анализ, НИ, София, 1980
13. Г. Крисчън, Дж. О'Рейли, Инструментлен анализ, Изд. СУ, София, 1998
14. A. Montaser, Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry, Willey - VCH 1998
15. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 1, Изд. Бином, 2011

Ръководител
Катедра аналитична химия
и компютърна химия :

доц. д-р В. Стефанова