

До Декана на ХФ
при ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

Д О К Л А Д
от доц. д-р Кирил Симитчиев
Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено на 15.03.2019 г., бе обсъдено предложение за промяна на наименованието на дисциплината **„Компютърно моделиране в химията“**, изучавана през VI семестър на Бакалавърска специалност Компютърна Химия (редовно обучение) в **„Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност“**. Промяната в наименованието и актуализирана версия на учебната програма за дисциплината **„Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност“** за специалност Компютърна химия бяха приети с 11 гласа „за“.

Моля ФС на ХФ да утвърди промяната в наименованието на горепосочената дисциплина (в сила от учебната 2019-2020 година) и нейната актуализирана учебна програма.

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

15.03.2019 г.

Ръководител КАХКХ:

доц. д-р Кирил Симитчиев

Препис-извлечение
от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”
от 15.03.2019

ПРОТОКОЛ № 4

На 15.03.2019 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 12

Присъстват 11

Отсъстват: гл.ас. А. Терзийски – в часове

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.4 от дневния ред беше разгледано предложение за промяна в Учебния план на Бакалавърска специалност „Компютърна химия“, редовно обучение - дисциплината „Компютърно моделиране в химията“, изучавана в VI семестър, да се преименува на "Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност". Предложена беше и актуализирана програма по тази дисциплина.

След обсъждане, предложенията за промяна на наименованието на дисциплината и актуализираната учебна програма бяха гласувани и приети с 11 гласа „за”.

15.03.2019

Протоколчик:

/П. Балабанова/



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

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Компютърна химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

трета

Семестър

VI

Брой ECTS кредити

6

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Анотация

Дисциплината "Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност" е логическо продължение на курса по Химична информатика, от който студентите са придобили базисни познания за представянето, обработката и анализа на информацията, касаеща съединенията и химичните реакции. От друга страна, курсът по "Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност" ефективно интегрира познанията на студентите по "Хеометрия" и химичните дисциплини с цел създаване на компютърни и математически модели за разглежданите химични обекти. Чрез усвоените методи за моделиране се осъществява втората част от последователността: данни → информация → знание. Важен акцент в дисциплината имат методите за моделиране (предсказване) на химични свойства и биологична активност и (QSPR/QSAR). За да усвоят методите QSAR студентите ще бъдат запознати в началото на курса с основните класове структурни дескриптори, методи за изчисляването им, тяхната взаимовръзка, подходите за избор на подходящи множества от дескриптори и основните начини за изграждане на модели въз основа на избраните дескриптори. Студентите ефективно ще използват своите знания по химична информатика, хеометрия и статистика. По време на упражненията, студентите от специалност "Компютърна химия" ще имат възможността да работят с висококачествен софтуер за компютърно моделиране в химията, разработен от известни научни групи по компютърна химия както и такъв разработен в Химическия Факултет на ПУ. Придобитите умения за компютърно моделиране ще съответстват на съвременните индустриални стандарти прилагани при откриването, дизайна, синтеза и производството на нови химични вещества с практическо приложение. С усвояния материал студентите ще имат добро стартово равнище за своето професионално реализиране, особено във фармацевтичните компании.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- различните класове молекулни дескриптори
- разширено множество от топологични дескриптори
- методи за линейно и нелинейно моделиране
- методи за моделиране посредством адитивни схеми
- подходи QSPR/QSAR за моделиране на химични свойства и биологична активност

2. Ще могат:

- да изчисляват топологични индекси
- да изчисляват молекулни 3D дескриптори
- извършват конформационен анализ и 3D моделиране
- да създават линейни и полиномиални модели на физико-химични свойства и биологична активност

- да осъществяват класически и модерен QSAR анализ

Начин на преподаване

Аудиторно: 75 ч.

- Лекции (45 часа),
- Лабораторни упражнения (30 часа)

Извънаудиторно: 105 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Препоръчително е студентите да са изучавали курсовете по: **Математика, Компютри и софтуер, Химична информатика, Органична химия.**

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основно компютърно обучение
- работа с операционни системи и файлове
- текстообработка и работа с електронни таблици
- основни познания по химична информатика
- представяне на структурна информация

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Линейно и нелинейно моделиране, Софтуерно програмиране в химията

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 25 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: инфраструктурата на C.lab
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- CC001000 – база данни от 1000 Инфра-червени спектри закупена от Chemical Concepts (Lab Control),
- IRSS – система за библиотечно търсене и интерпретация на информация в инфрачервени спектрални бази данни,
- редактори за структурна информация: IsisDraw, ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D структурите на химични съединения,
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- PCModel 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- CACTVS – система за представяне и обработка на структурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- GAMMES и MOPAC – пакети от програми за квантово химични изчисления
- JBSMM - софтуерна система за изчисляване на молекулни дескриптори и създаване на QSAR/QSPR модели
- Weka – система за статистическо моделиране
- CDK (Chemistry Development Kit)
- PaDEL-Descriptors – система за изчисляване на молекулни дескриптори
- KNIME
- Ambit-Standardizer

- GCM – софтуер за моделиране с помощта на адитивни схеми

Съдържание на курса

Курсът по **Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност** задълбочава знанията на студентите по химична информатика, като се акцентира на методите за изчисляване на топологични и геометрични молекулни дескриптори и приложението на разнообразни класически и съвременни методи за моделиране на физико-химични свойства и биологична активност: линейна и полиномиална регресия, адитивни схеми, изкуствени невронни мрежи, молекулна динамика, класически и съвременен QSAR анализ.

Упражненията имат за цел да дадат практически умения при осъществяването на основните практически етапи на моделирането: представяне и обработката на структурна информация, изчисляване на молекулни дескриптори, избор на работни извадки от химически обекти и подходящи дескриптори, създаване, статистическо валидиране, тестване и прилагане на моделите.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност

Тема	часове
1. Обхват на компютърното моделиране в химията. Основни химически обекти. Представяне на структури и химични реакции. Линейни нотации за представяне на структури, заявки за субструктурно търсене и химични реакции.	3
2. 3D структурно представяне. Молекулни повърхности. Метод на молекулната механика.	4
3. 3D структурни генератори. Конформационен анализ.	2
4. Молекулни дескриптори – обща класификация. Конституционни дескриптори. Топологични индекси. Характеристични полиноми и собствени стойности на топологични молекулни матрици.	3
5. 3D структурни дескриптори. Геометрични дескриптори. Електростатични дескриптори. Автокорелационни дескриптори. Комбинирани 2D и 3D дескриптори.	3
6. Класификация на методите за моделиране. Функционално-описани модели. Регресионни методи. Линейно моделиране. Нелинейни регресионни методи.	4
7. Предварителна обработка на данните. Анализ на главните компоненти (PCA). Статистическо валидиране на модел.	4
8. Моделиране с помощта на адитивни схеми. Адитивни схеми от нулев, първи и втори ред. Моделиране на топлини на образуване и LogP.	3

9. Въведение в изкуствените невронни мрежи. Неврон. Свързване на невроните в мрежа. Еднослойни мрежи. Многослойни мрежи. Обучение на мрежа.	4
10. Приложение на методите за претърсване на бази данни при компютърно моделиране. Принцип на подобие при QSPR/QSAR моделиране.	3
11. Метод на молекулната динамика. Режим на симулация. Приложения. Свързване на молекула с рецептор (docking).	3
12. QSAR - количествена взаимовръзка между структура и биологична активност на химичните обекти. Класически QSAR модели. Уравнения на Хамет. Анализ на Ханч. Анализ на Фрий-Уилсън.	3
13. 2D-QSAR методи. Нелинейни методи. 3D-QSAR методи. Метод CoMFA - сравнителен анализ на молекулните полета. nD-QSAR методи.	3
14. Приложения на Химичната информатика при разработката на лекарства. Основни етапи при разработката на лекарства. Профил на лиганд. Виртуален скрининг.	3
Общ брой часове:	45

Форми на текущ контрол:

I Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 7-ма седмица от семестъра

II Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 14-та седмица от семестъра

Б/ Упражнения по Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност

Тема	часове
1. Представяне на химични данни. Представяне на структурна информация: 2D представяне и линейна нотация SMILES.	2
2. Обработване на структурна информация. Определяне на топологически еквивалентни атоми. Описание на хирални атоми. Приложение на линейната нотация SMARTS.	2
3. Представяне на химични реакции. Приложение линейна нотация SMIRKS.	2
4. Метод на молекулната механика. Създаване на 3D молекулни модели.	2
5. Определяне на топлини на реакции с помощта на метода на молекулната механика.	2
6. Систематичен конформационен анализ на молекули.	2

7. Изчисляване на молекулни дескриптори. Определяне на геометричен радиус и геометричен диаметър на молекула. Определяне на топологични автокорелационни дескриптори на молекула.	2
8. Изчисляване на молекулни дескриптори. Създаване на обучителни и тестващи извадки. Обработка на данните. Анализ на главните компоненти (PCA).	3
9. Моделиране с помощта на линейни регресионни модели. Валидиране на модел.	3
10. Създаване на модели с помощта на изкуствени невронни мрежи.	2
11. Създаване на модели на химични свойства посредством адитивни схеми.	2
12. QSPR моделиране на коефициента на разпределение LogP.	2
13. 3D-QSAR. Метод CoMFA. Моделиране на взаимодействие лиганд-рецептор (docking).	4

Общ брой часове: 30

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и асистентите, както и с множество задания за домашна работа.

Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и специализирани скриптове за обработка на информация и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
Н. Кочев	Свитък лекционен курс - електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger (Ed.)	Handbook of Chemoinformatics Vol. 1, 2, 3, 4.	WILEY-VCH Verlag GmbH	2003
J. Gasteiger, T. Engel	Chemoinformatics a textbook	Wiley-VCH Verlag GmbH	2003
R. Todeschini, V. Consonni;	Handbook of Molecular Descriptors	WILEY-VCH Verlag GmbH & Co	2000
В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получат нагледна представа за разглеждания теоретичен материал. През семестъра (през 7-ма и 14-та седмица) са планирани два колоквиума, които подпомагат подготовката за изпит, а резултатите от текущия контрол участват във формиране на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени и с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта компютърни зали. По време на упражненията студентите усвояват нужните практически умения за работа с химически софтуер и статистическо моделиране под методическото ръководство на асистентите. Упражненията са задължителни.

В рамките на курса има планирани задачи за самостоятелна подготовка. Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат, справочници с данни, структурна и химична информация, софтуер и други помощни материали за самостоятелна подготовка) са достъпни за студентите на интернет страницата на ПУ на адрес:

<http://students.uni-plovdiv.net/>

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма са включени два колоквиума под формата на активен тест с изчислителни/практически задачи. Текущият контрол има за цел да провери степента на усвояване на преподавания учебен материал през семестъра. Оценява се и самостоятелната работа на студентите.

Дисциплината приключва с изпит - активен тест (35-40 въпроса), включващ всички теми от учебната програма.

Крайната оценка по дисциплината се формира от резултатите от текущия контрол и резултатите от крайния тестови изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

25% от оценката на I колоквиум + 25% от оценката на II колоквиум + 50% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....

До Декана на ХФ
при ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

Д О К Л А Д
от доц. д-р Кирил Симитчиев
Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено на 15.03.2019 г., бяха обсъдени и единодушно приети следните учебни програми:

- Учебна програма по задължителната дисциплината „**Практикум**“ за Бакалавърска специалност **Компютърна Химия**, редовно обучение;
- Учебна програма по задължителната дисциплината „**Химическа информатика**“ за Бакалавърска специалност **Компютърна Химия**, редовно обучение;
- Учебна програма по избираемата дисциплината „**Линейно и нелинейно моделиране**“ за Бакалавърска специалност **Компютърна Химия**, редовно обучение;
- Учебна програма по задължителната дисциплината „**Химическа информатика**“ за Бакалавърска специалност **Анализ и Контрол**, редовно обучение;
- Учебна програма по избираемата дисциплината „**Линейно и нелинейно моделиране**“ за Бакалавърска специалност **Анализ и Контрол**, редовно обучение;

Моля посочените учебни програми да бъдат внесени за утвърждаване от ФС на ХФ.

Прилагам препис-извлечение от протокола на катедрения съвет и учебните програми.

15.03.2019 г.

Ръководител КАХКХ:

доц. д-р Кирил Симитчиев

Препис-извлечение
от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”
от 15.03.2019

ПРОТОКОЛ № 4

На 15.03.2019 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 12

Присъстват 11

Отсъстват: гл.ас. А. Терзийски – в часове

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.5 от дневния ред бяха разгледани няколко актуализации на учебни програми:

- „Химическа информатика“ (задължителна) за Бакалавърска специалност Компютърна химия, редовно обучение,
- „Химическа информатика“ (задължителна) за Бакалавърска специалност Анализ и контрол, редовно обучение,
- „Практикум“ (задължителна) за Бакалавърска специалност Компютърна химия, редовно обучение,
- „Линейно и нелинейно моделиране“ (избираема) за Бакалавърска специалност Компютърна химия, редовно обучение,
- „Линейно и нелинейно моделиране“ (избираема) за Бакалавърска специалност Анализ и контрол, редовно обучение.

След обсъждане предложенията се гласуваха и приеха с 11 гласа „за”

15.03.2019

Протоколчик:

/П. Балабанова/



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

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Компютърна химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Практикум

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

четвърта

Семестър

VIII

Брой ECTS кредити

4

Отговорник за провеждането на практиката

Зам. декан по учебната работа на ХФ: Доц. д-р Виолета Стефанова

Анотация

Учебните занятия по дисциплината „Практика” имат за задача да затвърдят и разширят знанията, придобити в основните курсове включени в учебния план на специалността, като предоставят възможност на обучаващите се студенти да натрупат практически опит в реална работна среда. За целта студентите се разпределят в лаборатории, фирми, технологични и контролни звена, с които Химическият факултет е подписал договори за сътрудничество и обучение.

Методическо и практическо ръководство на практикантите се осъществява от ментори, които са водещи специалисти в съответните фирми, производствени звена или аналитични лаборатории. Студентите се запознават със задачите, които се изпълняват от конкретните звена на фирмите, изискванията към изпълнителските кадри, наличният инструментариум, дигитални ресурси и системите за контрол на качеството. Усвояват специфични за звеното информационни технологии, подходи за компютърно моделиране на свойства на химичните субстанции, овладяват експериментални техники и изпълняват практически задачи, които се възлагат на специалисти с висше химическо образование. Не на последно място, практикуващите студенти развиват умения за работа в екип и отговорност при изпълнение и докладване на резултатите от възложените им практически задачи.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- Същността и организацията на работа в отдели за изследователска и развойна дейност, във фармацевтични компании, компании работещи в областта на химичната информатика, наноинформатиката и разработването на дигитална среда за обслужване на научните изследвания в индустрията и подпомагане на регулаторната готовност на новите химически субстанции;
- Основните подходи за обработка на химична информация според принципите FAIR (Findability, Accessibility, Interoperability, and Reusability) – лесно намиране, достъпност, интероперабилност, многократно използване на данните;
- Видовете лицензи за достъп до научни данни и ресурси и добрите практики за работа в дигитална среда;
- Добрите практики за работа със съвременни химични бази данни в контекста на академични, индустриални и регулаторни институции.

2. Ще могат:

- Да работят със съвременни бази данни съдържащи химични субстанции и наноматериали с публичен и конфиденциален достъп;
- Да провеждат QSPR/QSAR моделиране, статистически анализи, read-across процедури и групиране на данни за научни, индустриални и регулаторни цели;
- Да работят със съвременни софтуерни технологии по химична информатика.

Аудиторно: 60 ч.

- Упражнения –в конкретни лаборатории и производствени звена (60 часа)

Извънаудиторно: 90 ч.

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали всички курсове по основните химически и компютърни дисциплини, както и специализиращите курсове по: Химична информатика, Компютърно моделиране на химична свойства и биологична активност, Хемометрия, Квантово-химични методи, Базисни данни и основи на програмирането, Алгоритми и обектно-ориентирано програмиране.

Студентите трябва да имат следните умения и познания:

- Базови компютърни умения и умения за работа със специализиран софтуер по химична информатика и статистическо моделиране;
- Теоретични знания за структурно представяне, линейни нотации, 3D структурно моделиране;
- Методи за изчисляване на дескриптори и QSAR/QSPR моделиране;
- Основните подходи на статистическото моделиране и хемометрията;
- Основни познания и умения за програмиране на поне един програмен език;

Техническо осигуряване на обучението

- Материалната база, информационната и комуникационна инфраструктура на фирми работещи в областта на химичната информатика, наноинформатика и биоинформатика, фармацевтични компании, производствени предприятия с химическа и биотехнологична насоченост, в които се провежда практиката;
- Облачни услуги и ресурси с отдалечен достъп на изследователски центрове и компании в България и Европа;
- Материалната база на химични лаборатории, в които се провежда практиката;

Съдържание на курса

Курсът по „Практика“, има за цел да разшири практическите познания и умения на студентите за работа в индустрията, отделите за изследователска и развойна дейност и приложението на химичната информатика в различните етапи от разработка на нови химични и био-продукти. Разглеждат се основните етапи от обработката на химичната информация и тяхното приложение за решаване на задачи от изследователски, индустриален или регулаторен характер. Запознават се със съвременните изисквания по отношение на обработка на информацията, сигурност на достъпа, принципите FAIR, работа с данни и софтуер с отворен достъп, контрола на качеството на данните и мета данните, отговарящи на индустриалните и регулаторните стандарти. Студентите се запознават с използваните методи, апаратура, софтуерни технологии и дигитални ресурси в конкретното фирмено звено, химичната лаборатория или производствен процес.

В зависимост от личните си предпочитания и своето ниво на компетенция, студентите ще имат възможност да изберат задачи фокусирани с повече практическа насоченост в химията, биоинформатиката, наноинформатиката, токсикологията и фармацевтичната индустрия или

задачи изискващи по-засилено използване на информационни технологии, софтуерно програмиране и моделиране със съвременни методи използващи големи колекции от данни (big data), изкуствен интелект и методите deep learning.

Тематична насоченост на практическите занятия

Тема	часове
1. Запознаване с организацията, задачите и правилата за безопасна работа и сигурност на данните в конкретното фирмено звено или лаборатория.	4
2. Запознаване с техническото оборудването и методите, използвани при изпълнение на конкретните задачи, информационната и комуникационна инфраструктура и ресурсите с отдалечен достъп на фирменото звено или лаборатория.	10
3. Запознаване със системата за контрол на качеството и отговорностите на всеки от изпълнителите във фирменото звено или лаборатория.	4
4. Изпълнение на практически задачи, възложени от водещия практиката специалист.	38
5. Докладване на резултатите от изпълнение на практическите задачи и поставяне на текуща оценка от водещия практиката специалист.	4
Общ брой часове:	60

В/ Самостоятелна подготовка

Студентите трябва да усвоят правилата, методите и подходите за изследване в конкретното фирмено звено и да изпълнят практическите задачи, възлагани от водещия практиката специалист. Въз основа на показаните резултати се оформя текущата оценка по дисциплината.

Библиография

Необходимата за подготовка на студентите литература се предоставя от водещия практиката специалист, в зависимост от характера на работата, извършвана в конкретното фирмено звено и може да обхваща:

- Материали, свързани с организацията на работата и задачите на звеното;
- Мерки за безопасни условия на труд в конкретното звено и сигурност на данните;
- Система за организация на работата, включително система за контрол на качеството и персонални отговорности на изпълнителите;
- Описание на методите за обработка на данни, сигурност на достъпа, софтуерните спецификации, провеждане на експериментални наблюдения, анализи и тестове;
- Изисквания към представяне, верифициране или контрол на получените резултати.
- Допълнителни материали свързани със спецификата на дейността на звеното.

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Дисциплината се провежда под формата на практически занятия, провеждани извън територията на Химическия факултет в реални фирмени звена или лаборатории, с които са подписани споразумения за съвместна работа и обучение на студенти, след предварително

съгласувана програма. Също така за целите на обучението, след предварително споразумение с фирмите и осигурен достъп от тяхна страна, могат да се провеждат теле-конференции връзки и работа с отдалечени информационни ресурси от личните компютри на студентите или чрез достъп от компютърните зали на Химическия факултет. Графикът на практическите занятия е съобразен и с учебните занятия през текущия семестър.

Методи и критерии на оценяване

Дисциплината приключва с текуща оценка.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Николай Кочев



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

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Компютърна химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Химическа информатика

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

първа

Семестър

I

Брой ECTS кредити

6

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Анотация

Химичната информатика е нова дисциплина, която прилага методите на информатиката при решаването на основни задачи в химията. Курсът предоставя базисни познания за представянето, обработването, анализа и моделирането на информацията касаеща двата основни химични обекта: химичните съединения и химичните реакции. Студентите от специалност "Компютърна химия" ще научат основните начини за представяне на структурна информация при компютърното третиране на химичните съединения: топологично представяне, линейна нотация SMILES, 2D и 3D представяния; метода на молекулната механика; подходите за структурно търсене в химични бази данни. По време на упражненията студентите ще усвоят работата с популярните структурни редактори и средствата за визуализация на тримерните структурни модели. Те ще се запознаят със съвременни софтуерни инструменти и ресурси по химична информатика публикувани в Интернет и ще задълбочат своите умения при работата с електронни таблици и обработката на химични данни.

Курсът е съобразен със съвременните индустриални стандарти за прилагането на химичната информатика в различните етапи на откриването, дизайна, синтеза и производството на биологично активни вещества и нови материали. Получените знания са необходимият минимум, за да може да се усвоят в следващите семестри дисциплините: Компютърно моделиране в химията и Компютърен дизайн на биологично-активни вещества. Получените познания също така ще са много полезни при изучаването на дисциплината Хемометрия.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- принципите и методите за представяне и обработка на структурна информация
- основни топологични дескриптори
- линейната нотация SMILES
- методът на молекулната механика (ММ)
- методи за 2D и 3D графично изобразяване на структурна информация
- методи за търсене на структурна информация

2. Ще могат:

- да работят с молекулни редактори
- да работят със софтуер за молекулно моделиране (метод на молекулната механика)
- да обработват структурна информация от интернет
- да представят структурна информация в няколко различни формата
- да осъществяват субструктурно търсене в химични бази данни

Аудиторно: 75 ч.

- Лекции (30 часа),
- Упражнения (45 часа)

Извънаудиторно: 105 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основни познания по линейна алгебра и математически анализ
- компютърна грамотност
- работа с операционни системи, файлове, текстови редактори и софтуер за електронни таблици (MS Excel)
- основни познания по обща и неорганична химия.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Линейно и нелинейно моделиране, Софтуерно програмиране в химията

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 25 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- CC001000 – база данни от 1000 Инфра-червени спектри закупена от Chemical Concepts (Lab Control)
- IRSS – система за библиотечно търсене и интерпретация на информация в инфрачервени спектрални бази данни
- редактори за структурна информация: ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D структурите на химични съединения
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика
- PCModel 7.0 и 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика
- CACTVS – система за представяне и обработка на структурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- KNIME – платформа за визуално програмиране на научни работни потоци, съчетаваща широк набор от инструменти
- Weka – система за анализ на данни, съдържаща богат набор от алгоритми за машинно обучение, предварителна обработка на информацията и пособия за визуализация на данни

Съдържание на курса

Курсът по Химична информатика запознава студентите с основните понятия и методи на химичната информатика: структурни представяния, химична графика, метод на молекулната механика, субструктурно търсене, молекулни дескриптори, химични бази данни.

Упражненията имат за цел да дадат практически умения при обработката и анализа на структурна и химична информация, както и използването на тази информация при химично моделиране.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Химична информатика

Тема	часове
1. Въведение в химичната информатика. Данни, информация, знание.	2
2. Представяне на структурна информация. Номенклатури. Линейни нотации. Топологично представяне. Матрични представяния.	2
3. Линейна нотация SMILES. Представяне на атоми, валентни връзки, разклонени и циклични структури. Описание на атомни атрибути. Описание на стерео информация. Описание на ароматни атоми. Производни езици на SMILES.	2
4. Двумерно представяне на химични структури. Тримерно представяне на структури. Молекулни повърхности.	2
5. Маркуш структури. Бит-вектори описващи множество от структурни фрагменти. Регистрационни номера. Хеш кодове. Представяне на електронни системи.	2
6. Химична графика. Векторна и растерна графика. Графично изобразяване на 2D и 3D представени структури.	2
7. Молекулни и структурни редактори. ISISDraw. ChemDraw. ChemSketch. CACTVS. ChemWindow. JME. Web базирани молекулни редактори.	2
8. Молекулни дескриптори. Топологични индекси.	2
9. Изоморфизъм на структури. Субструктурно търсене. Топологични атомни околности. Евристики базирани на атомните околности. Скрининг. Структурно търсене.	2
10. Топологически еквивалентни атоми. Химически еквивалентни атоми. Търсене на структури по подобие.	2
11. Метод на молекулната механика. Валентно силово поле. Минимизация на енергията и оптимизация на молекулната геометрия. Конформери и конформации.	2
12. Развитие на валентното силово поле. Методи за минимизация на енергията.	2
13. Параметризация на силово поле. Популярни силови полета. Силовото поле MM2/MM3/MM4.	2
14. Въведение в QSAR/QSPR. Модели на една променлива. Моделиране на свойства на алканите. Химиметрични методи.	2
15. Химични бази данни. Класификация. Бази данни на CAS, NCI, PDB, Beilstein. Спектрални библиотеки - структура и методи за търсене.	2

Форми на текущ контрол:

I Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 7-ма седмица от семестъра

II Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 14-та седмица от семестъра

Б/ Упражнения по Химична информатика

Тема	часове
1. Въведение в системата R. Работа с вектори и матрици. Генериране на графики. Работа с файлове.	6
2. Работа с химически пакети към системата R. Представяне на структурна информация в системата R и изчисляване на молекулни дескриптори.	9
3. Обработка на топологично представени структури. Определяне на таблицата на свързаност в две основни форми. Определяне на структурни представяния производни на таблицата на свързаност. Изчисляване на матрица на съседство и матрица на разстоянията.	3
4. Представяне на структури чрез линейна нотация SMILES. Интерпретация на SMILES и определяне топологична 2D структура. Работа с линейната нотация ROSDAL.	3
5. Обработка на двумерно представени структури. Работа с молекулни редактори.	3
6. Топологични индекси. Изчисляване на топологичните индекси на Уинер и Загреб. Индекси на свързаност - изчисляване на топологичните индекси на Рандич и Балабан.	3
7. Определяне на топологически еквивалентни атоми. Субструктурно търсене в бази данни.	3
8. Метод на молекулната механика. Създаване на 3D модели на химични съединения. Оптимизация на геометрията и минимизация на стеричната енергия. Моделиране на различни конформации на молекулите. Изчисляване на молекулен обем.	9
9. Създаване на QSPR модели на една променлива. Моделиране на температури на кипене на алкани. Теоретично предсказване на константата на киселинност и скоростни константи на хидролиза.	6

Общ брой часове: 45

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и асистентите, както и с множество задания за домашна работа.

Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залежали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и специализирани скриптове за обработка на информация и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
Н. Кочев	Свитък лекционен курс – електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger, T. Engel	Chemoinformatics a textbook	VCH Verlag GmbH & Co	2003
R. Todeschini, V. Consonni	Handbook of Molecular Descriptors	Wiley-VCH Verlag GmbH	2008
В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство при СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007
D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman.	Chemometrics: a textbook	Elsevier	1988

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал. През семестъра (през 7-ма и 14-та седмица) са планирани два колоквиума, които подпомагат подготовката за изпит, а резултатите от текущия контрол участват във формиране на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени и с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта компютърни зали. По време упражненията студентите усвояват нужните за успешната им реализация практически умения по химична информатика под методическото ръководство на асистентите. Упражненията по Химична информатика са задължителни. Занятията включват:

- решаване на теоретични и изчислителни задачи;
- практическа част – използване на софтуер при обработката на структурна и химическа информация, търсене в бази данни, молекулно моделиране и др.

В рамките на курса има планирани задачи за самостоятелна подготовка. Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат, справочници с данни, структурна и

химична информация, софтуер и други помощни материали за самостоятелна подготовка) са достъпни за студентите на интернет страницата на ПУ на адрес:

<http://students.uni-plovdiv.net/>

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма са включени два колоквиума под формата на активен тест с изчислителни/практически задачи. Текущият контрол има за цел да провери степента на усвояване на преподавания учебен материал през семестъра. Оценява се и самостоятелната работа на студентите.

Дисциплината приключва с изпит - активен тест (35-40 въпроса), включващ всички теми от учебната програма.

Крайната оценка по дисциплината се формира от резултатите от текущия контрол и резултатите от крайния тестови изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

25% от оценката на I колоквиум + 25% от оценката на II колоквиум + 50% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

Всички писмени работи (от текущ контрол и изпитни тестове) се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....



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

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Компютърна химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Линейно и нелинейно моделиране

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

четвърта

Семестър

VIII

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Анотация

Дисциплината "Линейно и нелинейно моделиране" задълбочава знанията на студентите придобити от дисциплините "Химична информатика", "Хеометрия" и "Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност". Курсът набляга на добрите практики за създаване и валидиране на модели според съвременните изисквания за ефективно прилагане на QSAR модели описани в официалната документация на OECD (Организация за Икономическо Сътрудничество и Развитие). В курса ефективно ще се използват вече придобитите знания за работа с молекулни дескриптори и по-задълбочено ще се разгледат математическите и алгоритмичните аспекти на различните методи за моделиране: линейна и нелинейна регресия, методи за разпознаване на образи и класификация. Друг съществен компонент на курса са методите за валидиране на модели и определяне на областта на приложимост на моделите.

По време на упражненията, студентите ще имат възможността да работят с висококачествен софтуер за компютърно моделиране в химията. Също така те ще създават собствени алгоритми за някои от изчислителните процедури. Придобитите умения за компютърно моделиране ще съответстват на съвременните индустриални стандарти прилагани при откриването, дизайна, синтеза и производството на биологично активни вещества.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- как да използват различни класове молекулни дескриптори
- линейни регресионни методи
- нелинейни регресионни методи
- добрите практики за създаване и валидиране на QSPR/QSAR модели

2. Ще могат:

- да изчисляват топологични индекси
- да изчисляват молекулни 3D дескриптори
- да избират подходящи дескриптори за даден модел
- да създават линейни и полиномиални регресионни модели
- да валидират статистически модели
- да определят област на приложимост на модел

Начин на преподаване**Аудиторно: 60 ч.**

- Лекции (30 часа),
- Лабораторни 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, Химична информатика, Компютърно моделиране на химични свойства и биологична активност, Хеометрия.**

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основно компютърно обучение
- работа с операционни системи и файлове
- основни познания по химична информатика
- представяне на структурна информация
- основни хеометрични подходи

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Софтуерно програмиране в химията

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 25 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- редактори за структурна информация: IsisDraw, ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D структурите на химични съединения,
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- PCModel 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- CACTVS – система за представяне и обработка на структурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- GAMMES и MOPAC – пакети от програми за квантово химични изчисления
- JBSMM - софтуерна система за изчисляване на молекулни дескриптори и създаване на QSAR/QSPR модели
- Weka – система за статистическо моделиране
- CDK (Chemistry Development Kit)
- OpenBabel – софтуер за обработка на структурна информация
- KNIME – платформа за визуално програмиране на научни работни потоци, съчетаваща широк набор от инструменти
- Weka – система за анализ на данни съдържаща богат набор от алгоритми за машинно обучение, предварителна обработка на информацията и пособия за визуализация на данни

Съдържание на курса

Курсът по “Линейно и нелинейно моделиране” запознава студентите с основните принципи за ефективно създаване на QSPR/QSAR модели, валидиране и определяне на област на приложимост. В лекциите се разглеждат добрите практики за моделиране, както са описани в официалната документация на OECD.

Упражненията имат за цел да дадат практически умения за решаването на задачите от всеки един етап на QSPR/QSAR моделирането: създаване на работна извадка съединения, изчисляване на молекулни дескриптори, избор на оптимално множество дескриптори, регресионно или друго моделиране, статистическо валидиране, определяне на област на приложимост на модела. Практическите умения ще бъдат изградени посредством множество задачи за моделиране на физико-химични свойства и биологична активност.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Линейно и нелинейно моделиране

Тема	часове
1. Представяне на химични структури. Линейни нотации. Файлови формати. Молекулни дескриптори. Топологични индекси. 3D геометрични дескриптори.	3
2. Подготовка на обучителни и тестови извадки. Откриване на „бегълци“ (outliers) излишъци в данни. Селектиране на дескриптори за моделиране.	3
3. Регресионни методи. Линейна и нелинейна регресия. Линейна регресия на много променливи.	2
4. Добри практики при създаване на модели. Официални документи на OECD.	3
5. Методи за статистическо валидиране на модели. Числови индикатори за качество на моделите. Прилагане на методите Cross-Validation, Boot Strapping и Y-scrambling.	4
6. Област на приложимост на модел. Методи за определяне на област на приложимост.	4
8. Принцип на подобие. 2D и 3D подобие на структури. Максимална обща подструктура на две структури. Приложение на принципа на подобие при създаване на модели.	2
9. Изкуствени невронни мрежи. Класификация. Свързаност. Еднослойни и многослойни мрежи. Обучение на мрежи. Делта правило за невронни мрежи с обратно разпространение на грешката. Мрежи с радиални базисни функции.	3
10. Химични приложения на изкуствените невронни мрежи. Методи за моделиране с „дълбоки“ невронни мрежи (deep learning).	2
11. Подходи за моделиране на биологична активност. Методи за 2D, 3D, 4D и 5D-QSAR.	4

Общ брой часове: 30

Форми на текущ контрол:

Практически тест - провежда се през 9-та седмица от семестъра
Курсова задача (представя се в края на семестъра)

Б/ Упражнения по Линейно и нелинейно моделиране

Тема	часове
1. Обработка на структурна информация. Работа с различни файлови формати. Конвертиране от едно структурно представяне в друго. Определяне на 3D структура. Работа с 3D генератори.	4
2. Работа с молекулни дескриптори. Изчисляване на топологични индекси и молекулни 3D дескриптори.	2
3. Параметризирано структурно търсене в химични бази данни. Подготовка на работни множества съединения за моделиране. Избор на оптимални дескриптори.	2
4. Моделиране посредством многостъпкова линейна и полиномиална регресия.	2
5. Създаване на модели на химични свойства посредством адитивни схеми от нулев и първи ред. Включване на корекционни фактори.	4
6. Статистическо валидиране на модели.	2
7. Определяне на област на приложимост (ОП) на модел.	2
10. QSPR – моделиране на физико-химични свойства. Комбинирано упражнение: избор на дескриптори, моделиране, валидиране и определяне на ОП.	4
11. QSAR - моделиране на биологична активност. Комбинирано упражнение: избор на дескриптори, моделиране, валидиране и определяне на ОП.	4
12. Моделиране с помощта на изкуствени невронни мрежи.	4
Общ брой часове:	30

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и асистентите, както и с множество задания за домашна работа.

Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и специализирани скриптове за обработка на

информация и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Студентите трябва да разработят **курсова работа** (създаване на QSPR/QSAR модели, презентация по тематика, създаване на химична база данни и други проблеми в химичната информатика). Свитъкът с индивидуални задачи за всеки студент се предоставя от асистента до 6-та седмица на семестъра. Курсовата работа се предава до 14-та седмица от семестъра.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
Н. Кочев	Свитък лекционен курс – електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		2012
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger (Ed.)	Handbook of Chemoinformatics Vol. 1, 2, 3, 4.	WILEY-VCH Verlag GmbH	2003
R. Todeschini, V. Consonni;	Handbook of Molecular Descriptors	WILEY-VCH Verlag GmbH & Co	2000
В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007
D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman.	Chemometrics: a textbook	Elsevier	1988

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал. През семестъра са планирани практически тест, който подпомага подготовката за изпита и курсова задача. Резултатите от текущия контрол участват във формиране на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени и с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта компютърни зали. По време упражненията студентите усвояват нужните им практически умения за химично моделиране под методическото ръководство на асистентите. Упражненията са задължителни.

В рамките на курса има планирани задачи за самостоятелна подготовка. Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат, справочници с данни, софтуер и други помощни материали за самостоятелна подготовка) са достъпни за студентите на интернет страницата на ПУ на адрес: <http://students.uni-plovdiv.net/>

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма е включен практически тест. Текущият контрол има за цел да провери степента на усвояване на преподавания учебен материал през семестъра. Оценява се и самостоятелната работа на студентите.

Дисциплината приключва с теоретичен изпит.

Крайната оценка по дисциплината се формира от 3 компонента: резултати от текущ контрол; резултати от самостоятелна курсова работа и резултати от семестриалния изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

30% от оценката на практическия тест + 30% от оценката на курсовата работа + 40% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

Всички писмени работи (от текущ контрол, курсова работа и изпитни тестове) се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....



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

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Анализ и контрол (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Химическа информатика

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

втора

Семестър

III

Брой ECTS кредити

6

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Анотация

Химичната информатика е съвременна дисциплина, която прилага методите на информатиката при решаването на основни задачи в химията. Курсът предоставя базисни познания за представянето, обработването, анализа и моделирането на информацията касаеща двата основни химични обекта: химичните съединения и химичните реакции. Студентите от специалност "Анализ и контрол" ще научат основните начини за представяне на структурна информация при компютърното третиране на химичните съединения: топологично представяне, линейна нотация SMILES, 2D и 3D представяния; метода на молекулната механика; подходите за структурно търсене в химични бази данни. По време на упражненията студентите ще усвоят работата с популярните структурни редактори и средствата за визуализация на тримерни структурни модели. Те ще се запознаят с популярни софтуерни инструменти и ресурси по химична информатика публикувани в Интернет и ще задълбочат своите умения при работата с електронни таблици и обработката на химични данни.

Курсът е съобразен със съвременните индустриални стандарти за прилагането на химичната информатика в различните етапи на откриването, дизайна, синтеза и производството на биологично активни вещества и нови материали. Получените знания са много полезни при изучаването на дисциплината Хемометрия.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- принципите и методите за представяне и обработка на структурна информация
- основни топологични дескриптори
- линейната нотация SMILES
- методът на молекулната механика (ММ)
- методи за 2D и 3D графично изобразяване на структурна информация
- методи за търсене на структурна информация

2. Ще могат:

- да работят с молекулни редактори
- да работят със софтуер за молекулно моделиране (метод на молекулната механика)
- да обработват структурна информация от интернет
- да представят структурна информация в няколко различни формата
- да осъществяват субструктурно търсене в химични бази данни

Начин на преподаване**Аудиторно: 60 ч.**

- Лекции (30 часа),
- Упражнения (30 часа)

Извънаудиторно: 90 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: **Математика, Компютри и софтуер, Обща и неорганична химия.**

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основни познания по линейна алгебра и математически анализ
- компютърна грамотност
- работа с операционни системи, файлове, текстови редактори и софтуер за електронни таблици (MS Excel)
- основни познания по обща и неорганична химия.

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Линейно и нелинейно моделиране, Софтуерно програмиране в химията

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 25 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- CC001000 – база данни от 1000 Инфра-червени спектри закупена от Chemical Concepts (Lab Control)
- IRSS – система за библиотечно търсене и интерпретация на информация в инфрачервени спектрални бази данни
- редактори за структурна информация: ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D структурите на химични съединения
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика
- PCModel 7.0 и 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика
- CACTVS – система за представяне и обработка на структурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- KNIME – платформа за визуално програмиране на научни работни потоци, съчетаваща широк набор от инструменти
- Weka – система за анализ на данни, съдържаща богат набор от алгоритми за машинно обучение, предварителна обработка на информацията и пособия за визуализация на данни

Съдържание на курса

Курсът по Химична информатика запознава студентите с основните понятия и методи на химичната информатика: структурни представяния, химична графика, метод на молекулната механика, субструктурно търсене, молекулни дескриптори, химични бази данни.

Упражненията имат за цел да дадат практически умения при обработката и анализа на структурна и химична информация, както и използването на тази информация при химично моделиране.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Химична информатика

Тема	часове
1. Въведение в химичната информатика. Данни, информация, знание.	2
2. Представяне на структурна информация. Номенклатури. Линейни нотации. Топологично представяне. Матрични представяния.	2
3. Линейна нотация SMILES. Представяне на атоми, валентни връзки, разклонени и циклични структури. Описание на атомни атрибути. Описание на стерео информация. Описание на ароматни атоми. Производни езици на SMILES.	2
4. Двумерно представяне на химични структури. Тримерно представяне на структури. Молекулни повърхности.	2
5. Маркуш структури. Бит-вектори описващи множество от структурни фрагменти. Регистрационни номера. Хеш кодове. Представяне на електронни системи.	2
6. Химична графика. Векторна и растерна графика. Графично изобразяване на 2D и 3D представени структури.	2
7. Молекулни и структурни редактори. ISISDraw. ChemDraw. ChemSketch. CACTVS. ChemWindow. JME. Web базирани молекулни редактори.	2
8. Молекулни дескриптори. Топологични индекси.	2
9. Изоморфизъм на структури. Субструктурно търсене. Топологични атомни околности. Евристики базирани на атомните околности. Скрининг. Структурно търсене.	2
10. Топологически еквивалентни атоми. Химически еквивалентни атоми. Търсене на структури по подобие.	2
11. Метод на молекулната механика. Валентно силово поле. Минимизация на енергията и оптимизация на молекулната геометрия. Конформери и конформации.	2
12. Развитие на валентното силово поле. Методи за минимизация на енергията.	2
13. Параметризация на силово поле. Популярни силови полета. Силовото поле MM2/MM3/MM4.	2
14. Въведение в QSAR/QSPR. Модели на една променлива. Моделиране на свойства на алканите. Химиметрични методи.	2
15. Химични бази данни. Класификация. Бази данни на CAS, NCI, PDB, Beilstein. Спектрални библиотеки - структура и методи за търсене.	2

Форми на текущ контрол:

I Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 7-ма седмица от семестъра

II Колоквиум върху 50% от учебния материал (активен тест с изчислителни задачи)

Провежда се през 14-та седмица от семестъра

Б/ Упражнения по Химична информатика

Тема	часове
1. Обработка на топологично представени структури. Определяне на таблицата на свързаност в две основни форми. Определяне на структурни представяния производни на таблицата на свързаност. Изчисляване на матрица на съседство и матрица на разстоянията.	3
2. Представяне на структури чрез линейна нотация SMILES. Интерпретация на SMILES и определяне топологична 2D структура. Работа с линейната нотация ROSDAL.	3
3. Обработка на двумерно представени структури. Работа с молекулни редактори.	3
4. Топологични индекси. Изчисляване на топологичните индекси на Уинер и Загреб. Индекси на свързаност - изчисляване на топологичните индекси на Рандич и Балабан.	3
5. Определяне на топологически еквивалентни атоми. Субструктурно търсене в бази данни.	3
6. Метод на молекулната механика. Създаване на 3D модели на химични съединения. Оптимизация на геометрията и минимизация на стеричната енергия. Моделиране на различни конформации на молекулите. Изчисляване на молекулен обем.	9
7. Създаване на QSPR модели на една променлива. Моделиране на температури на кипене на алкани. Теоретично предсказване на константата на киселинност и скоростни константи на хидролиза.	6

Общ брой часове: 30

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и асистентите, както и с множество задания за домашна работа.

Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и специализирани скриптове за обработка на

информация и др. Материалите и софтуерът за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Библиография

<i>Автор</i>	<i>Заглавие</i>	<i>Издателство</i>	<i>Година</i>
Н. Кочев	Свитък лекционен курс – електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger, T. Engel	Chemoinformatics a textbook	VCH Verlag GmbH & Co	2003
R. Todeschini, V. Consonni	Handbook of Molecular Descriptors	Wiley-VCH Verlag GmbH	2008
В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство при СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007
D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman.	Chemometrics: a textbook	Elsevier	1988

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал. През семестъра (през 7-ма и 14-та седмица) са планирани два колоквиума, които подпомагат подготовката за изпита, а резултатите от текущия контрол участват във формиране на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени и с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта компютърни зали. По време упражненията студентите усвояват нужните за успешната им реализация практически умения по химична информатика под методическото ръководство на асистентите. Упражненията по Химична информатика са задължителни. Занятията включват:

- решаване на теоретични и изчислителни задачи;
- практическа част – използване на софтуер при обработката на структурна и химическа информация, търсене в бази данни, молекулно моделиране и др.

В рамките на курса има планирани задачи за самостоятелна подготовка. Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат, справочници с данни, структурна и химична информация, софтуер и други помощни материали за самостоятелна подготовка) са достъпни за студентите на интернет страницата на ПУ на адрес:

<http://students.uni-plovdiv.net/>

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма са включени два колоквиума под формата на активен тест с изчислителни/практически задачи. Текущият контрол има за цел да провери степента на усвояване на преподавания учебен материал през семестъра. Оценява се и самостоятелната работа на студентите.

Дисциплината приключва с изпит - активен тест (35-40 въпроса), включващ всички теми от учебната програма.

Крайната оценка по дисциплината се формира от резултатите от текущия контрол и резултатите от крайния тестови изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

25% от оценката на I колоквиум + 25% от оценката на II колоквиум + 50% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

Всички писмени работи (от текущ контрол и изпитни тестове) се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

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

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Анализ и контрол (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Линейно и нелинейно моделиране

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

четвърта

Семестър

VIII

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Анотация

Дисциплината "Линейно и нелинейно моделиране" задълбочава знанията на студентите придобити от дисциплините "Химична информатика" и "Хеометрия". Курсът набляга на добрите практики за създаване и валидиране на модели според съвременните изисквания за ефективно прилагане на QSAR модели описани в официалната документация на OECD (Организация за Икономическо Сътрудничество и Развитие). В курса ефективно ще се използват вече придобитите знания за работа с молекулни дескриптори и по-задълбочено ще се разгледат математическите и алгоритмичните аспекти на различните методи за моделиране: линейна и нелинейна регресия, методи за разпознаване на образи и класификация. Друг съществен компонент на курса са методите за валидиране на модели и определяне на областта на приложимост на моделите.

По време на упражненията, студентите ще имат възможността да работят с висококачествен софтуер за компютърно моделиране в химията. Също така те ще създават собствени алгоритми за някои от изчислителните процедури. Придобитите умения за компютърно моделиране ще съответстват на съвременните индустриални стандарти прилагани при откриването, дизайна, синтеза и производството на биологично активни вещества.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. Ще знаят:

- как да използват различни класове молекулни дескриптори
- линейни регресионни методи
- нелинейни регресионни методи
- добрите практики за създаване и валидиране на QSPR/QSAR модели

2. Ще могат:

- да изчисляват топологични индекси
- да изчисляват молекулни 3D дескриптори
- да избират подходящи дескриптори за даден модел
- да създават линейни и полиномиални регресионни модели
- да валидират статистически модели
- да определят област на приложимост на модел

Начин на преподаване**Аудиторно: 60 ч.**

- Лекции (30 часа),
- Лабораторни 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, Химична информатика, Хеометрия.**

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основно компютърно обучение
- работа с операционни системи и файлове
- основни познания по химична информатика
- представяне на структурна информация
- основни хеометрични подходи

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Софтуерно програмиране в химията

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 25 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- редактори за структурна информация: IsisDraw, ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D структурите на химични съединения,
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- PCModel 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- CACTVS – система за представяне и обработка на структурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- GAMMES и MOPAC – пакети от програми за квантово химични изчисления
- JBSMM - софтуерна система за изчисляване на молекулни дескриптори и създаване на QSAR/QSPR модели
- Weka – система за статистическо моделиране
- CDK (Chemistry Development Kit)
- OpenBabel – софтуер за обработка и конвертиране на структурна информация
- KNIME – платформа за визуално програмиране на научни работни потоци, съчетаваща широк набор от инструменти
- Weka – система за анализ на данни, съдържаща богат набор от алгоритми за машинно обучение, предварителна обработка на информацията и пособия за визуализация на данни

Съдържание на курса

Курсът по “Линейно и нелинейно моделиране” запознава студентите с основните принципи за ефективно създаване на QSPR/QSAR модели, валидиране и определяне на област на приложимост. В лекциите се разглеждат добрите практики за моделиране, както са описани в официалната документация на OECD.

Упражненията имат за цел да дадат практически умения за решаването на задачите от всеки един етап на QSPR/QSAR моделирането: създаване на работна извадка съединения,

изчисляване на молекулни дескриптори, избор на оптимално множество дескриптори, регресионно или друго моделиране, статистическо валидиране, определяне на област на приложимост на модела. Практическите умения ще бъдат изградени посредством множество задачи за моделиране на физико-химични свойства и биологична активност.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Линейно и нелинейно моделиране

Тема	часове
1. Представяне на химични структури. Линейни нотации. Файлови формати. Молекулни дескриптори. Топологични индекси. 3D геометрични дескриптори.	3
2. Подготовка на обучителни и тестови извадки. Откриване на „бегълци“ (outliers) излишъци в данни. Селектиране на дескриптори за моделиране.	3
3. Регресионни методи. Линейна и нелинейна регресия. Линейна регресия на много променливи.	2
4. Добри практики при създаване на модели. Официални документи на OECD.	3
5. Методи за статистическо валидиране на модели. Числови индикатори за качество на моделите. Прилагане на методите Cross-Validation, Boot Strapping и Y-scrambling.	4
6. Област на приложимост на модел. Методи за определяне на област на приложимост.	4
8. Принцип на подобие. 2D и 3D подобие на структури. Максимална обща подструктура на две структури. Приложение на принципа на подобие при създаване на модели.	2
9. Изкуствени невронни мрежи. Класификация. Свързаност. Еднослойни и многослойни мрежи. Обучение на мрежи. Делта правило за невронни мрежи с обратно разпространение на грешката. Мрежи с радиални базисни функции.	3
10. Химични приложения на изкуствените невронни мрежи. Методи за моделиране с „дълбоки“ невронни мрежи (deep learning).	2
11. Подходи за моделиране на биологична активност. Методи за 2D, 3D, 4D и 5D-QSAR.	4

Общ брой часове: 30

Форми на текущ контрол:

Практически тест - провежда се през 9-та седмица от семестъра
Курсова задача (представя се в края на семестъра)

Б/ Упражнения по Линејно и нелинейно моделирање

Тема	часове
1. Обработка на структурна информация. Работа с различни файлови формати. Конвертиране от едно структурно представяне в друго. Определяне на 3D структура. Работа с 3D генератори.	4
2. Работа с молекулни дескриптори. Изчисляване на топологични индекси и молекулни 3D дескриптори.	2
3. Параметризирано структурно търсене в химични бази данни. Подготовка на работни множества съединения за моделиране. Избор на оптимални дескриптори.	2
4. Моделиране посредством многостъпкова линейна и полиномиална регресия.	2
5. Създаване на модели на химични свойства посредством адитивни схеми от нулев и първи ред. Включване на корекционни фактори.	4
6. Статистическо валидиране на модели.	2
7. Определяне на област на приложимост (ОП) на модел.	2
10. QSPR – моделиране на физико-химични свойства. Комбинирано упражнение: избор на дескриптори, моделиране, валидиране и определяне на ОП.	4
11. QSAR - моделиране на биологична активност. Комбинирано упражнение: избор на дескриптори, моделиране, валидиране и определяне на ОП.	4
12. Моделиране с помощта на изкуствени невронни мрежи.	4
Общ брой часове:	30

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации со лектора и асистентите, както и со множество задания за домашна работа.

Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създавање на презентации по определена тематика, обработка на хемична информација свързана со текущи научни проекти во универститета, създавање на бази данни и специализирани скриптове за обработка на информација и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси со хемически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Студентите трябва да разработят **курсова работа** (създаване на QSPR/QSAR модели, презентация по тематика, създаване на химична база данни и други проблеми в химичната информатика). Свитъкът с индивидуални задачи за всеки студент се предоставя от асистента до 6-та седмица на семестъра. Курсовата работа се предава до 14-та седмица от семестъра.

Библиография

Автор	Заглавие	Издателство	Година
Н. Кочев	Свитък лекционен курс – електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger (Ed.)	Handbook of Chemoinformatics Vol. 1, 2, 3, 4.	WILEY-VCH Verlag GmbH	2003
R. Todeschini, V. Consonni;	Handbook of Molecular Descriptors	WILEY-VCH Verlag GmbH & Co	2000
В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007
D. Massart, B. Vandenginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman.	Chemometrics: a textbook	Elsevier	1988

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал. През семестъра са планирани практически тест, който подпомага подготовката за изпита и курсова задача. Резултатите от текущия контрол участват във формиране на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени и с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта компютърни зали. По време упражненията студентите усвояват нужните им практически умения за химично моделиране под методическото ръководство на асистентите. Упражненията са задължителни.

В рамките на курса има планирани задачи за самостоятелна подготовка. Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат, справочници с данни, софтуер и други помощни материали за самостоятелна подготовка) са достъпни за студентите на интернет страницата на ПУ на адрес: <http://students.uni-plovdiv.net/>

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма е включен практически тест. Текущият контрол има за цел да провери степента на усвояване на преподавания учебен материал през семестъра. Оценява се и самостоятелната работа на студентите.

Дисциплината приключва с теоретичен изпит.

Крайната оценка по дисциплината се формира от 3 компонента: резултати от текущ контрол; резултати от самостоятелна курсова работа и резултати от семестриалния изпит.

Оценката се изчислява по следната формула:

30% от оценката на практическия тест + 30% от оценката на курсовата работа + 40% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

Всички писмени работи (от текущ контрол, курсова работа и изпитни тестове) се съхраняват в продължение на 1 година от датата на провеждане на семестриалния изпит.

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....

Списък

на учебните програми за Биологическия факултет

1. За специалност „Биология и химия“ – редовно обучение
 - Обща и неорганична химия – I част
 - Обща и неорганична химия – II част
 - Аналитична химия
 - Органична химия – I част
 - Органична химия – II част
 - Физикохимия – I част
 - Физикохимия – II част
 - Химични технологии
 - Методика на обучението по химия
 - Инструментални методи в химията
 - Химия на полимерите
 - Хоспетиране и текуща учебна практика по химия
 - Методика и техника на учебния експеримент по химия
 - Стажантска практика по химия
 - Методи на педагогическите изследвания в обучението по химия
 - Основни химични понятия в обучението по Човек и природа
 - Екологично образование в обучението по химия
 - Учебните задачи в обучението по химия
 - Рефлексията в обучението по химия
 - Обяснението в обучението по химия
 - Химия на отровните вещества
 - Химия на лекарствените вещества
 - Химическата промишленост в България
 - Химия на хранителните продукти
 - Съвременни хроматографски методи
 - Приложна колоидна химия
 - Биокатализ и биоелектрохимия
2. За специалност „Биология“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
3. За специалност „Молекулярна биология“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
4. За специалност „Медицинска биология“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
5. За специалност „Екология и опазване на околната среда“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
6. За специалност „Екология на биотехнологичните производства“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
7. За специалност „Приложна и индустриална екология“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи за анализ
8. За специалност „Фармацевтични биотехнологии“ – редовно обучение
 - Аналитична химия с инструментални методи

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

ДОКЛАД

от доц. д-р Стоянка Атанасова,
ръководител катедра Органична химия

Господин Декан,

Моля да внесете във факултетния съвет предложението на катедра „Органична химия“, дисциплините „Химия на органичните вещества в парфюмерийно-козметичната промишленост“ и „Химия на хетероциклените съединения“ да не се изучават от студенти със специалност „Биология и химия“ бакалаври, редовно обучение.

Прилагам препис-извлечение от протокола на КС.

11.03.2019г.

Пловдив

Ръководител катедра: 

(доц. д-р С. Атанасова)

Препис-извлечение
от заседание на
катедра “Органична химия”
от 11.03.2019 г.

Протокол № 305

На 11.03.2019г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Органична химия”.

Общ състав 8. Присъстват 6: доц. д-р Стоянка Николова, доц. д-р Стела Статкова, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Солея Даньо, гл. ас. д-р Димитър Божилов, ас. д-р Йордан Стремски. Отсъстват 2: доц. д-р Румяна Бакалска-на лекции, гл. ас. д-р Станимир Манолов – отпуск.

Необходим брой за положителен избор 4.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По т.1 от дневния ред доц. д-р Стела Статкова предложи учебните програми за избираемите дисциплини „Химия на органичните вещества в парфюмерийно-козметичната промишленост“ и „Химия на хетероциклените съединения“ да не се изучават от студенти със специалност „Биология и химия“ бакалаври редовно обучение.

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложението на доц. д-р Стела Статкова .

11.03.2019 г.
гр. Пловдив

Протоколчик:
(гл. ас. д-р Д. Божилов)

До Доц. д-р Веселин Кметов
Декан на Химически Факултет
при ПУ „П. Хилендарски“
Пловдив

ДОКЛАД

от доц. д-р Ваня Лекова

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Уважаеми доц. Кметов,

Моля да внесете във ФС на ХФ за обсъждане и утвърждаване на учебни програми за задължителни, избираеми и факултативни дисциплини, съгласно учебните планове за придобиване на ОКС „Магистър“ Учител по химия – специалисти, редовно и задочно обучение и неспециалисти, редовно и задочно обучение – утвърдени с решение на АС протокол № 27 /23.04.2018 г., както следва:

I. Задължителни дисциплини:

1. Методика на профилираното обучение по химия
2. Методология и методи на педагогическите изследвания
3. Курсов проект за диагностично изследване
4. Стажантска практика по химия

II. Избираеми дисциплини:

1. Психология на личността
2. Психология на общуването
3. Съвременни образователни технологии в обучението
4. Училищно законодателство и учебна документация
5. Развитие на ключови компетентности чрез обучението по химия
6. Интелектуално възпитание чрез обучението по природни науки
7. Екологично възпитание чрез обучението по природни науки
8. Наблюдението и химичният експеримент в обучението по химия
9. Учебни задачи по химия в СУ
10. Бионеорганична химия

III .Факултативни дисциплини:

1. История на химията
2. Рефлексия в обучението

Предложените учебните програми бяха обсъдени и приети на катедрен съвет.

Приложение:

1. Препис от протокол №174 /08.03.2019 г.
2. Учебни програми.

08.03.2019 г.

гр. Пловдив

С уважение:

/доц. Ваня Лекова/

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Препис извлечение
от заседание на катедра
ОНХМОХ
от 08.03.2019 г.

Протокол № 174

На 08.03.2019 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 7. Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Йорданка Димова, доц. д-р Петя Маринова, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева, гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 1. Учебни въпроси:

1.1. Учебни програми за задължителни, избираемми и факултативни дисциплини, за придбиване на ОКС „Магистър“ Учител по химия – специалисти, редовно и задочно обучение и за неспециалисти, редовно и задочно обучение – съгласно утвърдените учебни планове с решение на АС протокол № 27 / 23.04.2018 г.

Доц. Лекова уточни, че на хартиен носител са представени за разглеждане и обсъждане на учебните програми за посочените по-долу задължителни, избираеми и факултативни дисциплини, които са разработени по учебните планове, като са съобразени с формата на обучение (редовна и задочна), магистри (специалисти и неспециалисти), хорариум, кредити, аудиторна и извънаудиторна заетост:

I. Задължителни дисциплини:

1. Методика на профилираното обучение по химия
2. Методология и методи на педагогическите изследвания
3. Курсов проект за диагностично изследване
4. Стажантска практика по химия

II. Избираеми дисциплини:

1. Психология на личността
2. Психология на общуването
3. Съвременни образователни технологии в обучението
4. Училищно законодателство и учебна документация
5. Развитие на ключови компетентности чрез обучението по химия
6. Интелектуално възпитание чрез обучението по природни науки
7. Екологично възпитание чрез обучението по природни науки
8. Наблюдението и химичният експеримент в обучението по химия
9. Учебни задачи по химия в СУ

10. Бионеорганична химия

III .Факултативни дисциплини:

1. История на химията

2. Рефлексия в обучението

Програмите са предложени за гласуване.

След проведеното гласуване, учебните програми бяха приети със 7 гласа „за“.

08.03.2019 г.

Пловдив

Протоколчик:

/Милена Славова/

До Декана
на Химически факултет
при ПУ „П. Хилендарски“
Тук

ДОКЛАД

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

Господин Декан,

На 14.03.2019 г. се състоя Катедрен съвет, на който бяха разгледани учебните програми по следните избираеми дисциплини за магистърска програма *Учител по химия*:

За неспециалисти:

- *Хранителни вещества и хигиена на храненето* (IV сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на *редовно обучение*;
- *Хранителни вещества и хигиена на храненето* (IV сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на *задочно обучение*;
- *Химия на полимерите* (IV сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на *редовно обучение*;
- *Химия на полимерите* (IV сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на *задочно обучение*.

За специалисти:

- *Хранителни вещества и хигиена на храненето* (II сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на *редовно обучение*;
- *Хранителни вещества и хигиена на храненето* (II сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на *задочно обучение*;
- *Химия на полимерите* (II сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на *редовно обучение*;
- *Химия на полимерите* (II сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на *задочно обучение*.

След обсъждане, бе решено да се предложи на Факултетния съвет да утвърди предложените учебни програми.

Прилагам препис от протокола на Катедрения съвет.

15.03.2019 г.

Ръководител катедра ХТ:

(доц. д-р М. Ангелова-Ромова)



Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"
Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 122

от катедрено съвещание

Препис

Днес 14.03.2019 год. се състоя съвещание на кат. Химична технология.

Присъстваха: проф. д-р Г. Антова, доц. д-р М. Ангелова-Ромова, доц. д-р Г. Патронов, гл. ас. д-р Ж. Петкова, гл. ас. д-р И. Костова, ас. П. Янев, хим. Ж. Симеонова.

Отсъстваха: доц. д-р Д. Тончев – в неплатен отпуск, гл. ас. д-р О. Тенева – в платен отпуск.

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Учебни въпроси

Членовете на катедрения съвет обсъдиха учебните програми по следните избираеми дисциплини за магистърска програма Учител по химия:

За неспециалисти:

- Хранителни вещества и хигиена на храненето (IV сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на редовно обучение;
- Хранителни вещества и хигиена на храненето (IV сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на задочно обучение;
- Химия на полимерите (IV сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на редовно обучение;
- Химия на полимерите (IV сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на задочно обучение.

За специалисти:

- Хранителни вещества и хигиена на храненето (II сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на редовно обучение;
- Хранителни вещества и хигиена на храненето (II сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор доц. д-р Мария Ангелова-Ромова, предвидена в учебния план на задочно обучение;

• Химия на полимерите (II сем.) с хорариум 15/0/15 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на редовно обучение;

• Химия на полимерите (II сем.) с хорариум 5/0/10 и лектор проф. д-р Гинка Антова, предвидена в учебния план на задочно обучение.

След обсъждане, бе решено да се предложи на Факултетния съвет да утвърди предложените учебни програми.

Протоколирал:



(хим. Ж. Симеонова)

До Декана на ХФ
при ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра АХКХ, проведено на 15.03.2019, бе разгледан и приет (11 гласа „за“) индивидуален план за работата на редовен докторант по Теоретична химия (Химична информатика) **Гергана Илиева Танчева** по тема: „**Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали**“ с научен ръководител: **доц. д-р Николай Тодоров Кочев**.

Моля, Факултетният съвет да утвърди предложения план за обучение на докторанта.

Прилагам:

1. Индивидуален план за работа на докторанта **Гергана Танчева**;
2. Препис-извлечение от Протокол на КС на КАХКХ.

15.03.2019 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”
от 15.03.2019

ПРОТОКОЛ № 4

На 15.03.2019 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра
“Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 12

Присъстват 11

Отсъстват: гл.ас. А. Терзийски – в часове

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.3 от дневния ред беше разгледан индивидуалния план за работа на Гергана Илиева Танчева, редовен докторант по Теоретична химия (Химична информатика) на тема: „Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали” с научен ръководител: доц. д-р Николай Тодоров Кочев.

След обсъждане предложението се гласува и прие с 11 гласа „за”

15.03.2019

Протоколчик:

/П. Балабанова/

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО И НАУКАТА
ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

Докторантура: редовна

Химически факултет
Катедра аналитична химия и компютърна химия

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Име, презиме, фамилия: **Гергана Илиева Танчева**
2. Дата на записване в докторантура: **01.03.2019**
3. Заповед № **Р33 – 936** от **20.02.2019** година
4. Срок за завършване на докторантурата: **01.03.2022** година
5. Област на висше образование: **4. Природни науки, математика и информатика**
6. Професионално направление **4.2. Химически науки**
докторска програма: **Теоретична химия**
7. Тема на дисертационния труд: **„Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали“**
8. Утвърдена от ФС, протокол № **205** от **14.02.2019** година
7. Научен ръководител: **доц. д-р Николай Тодоров Кочев**
8. Индивидуалният учебен план за работа е утвърден от ФС протокол №..... от

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

ДЕКАН:
(доц. д-р Веселин Кметов)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Форми
I. Анализ на състоянието на изследванията по проблема		
1. Работа над дисертацията – литературен обзор: преглед и обобщение на научните публикации за: • обработката на данни за химични субстанции и наноматериали чрез структурно представяне, автоматично изчистване на данни, стандартизация, нормализация и агрегиране; • проблематиката касаеща третирането на субстанциите в съвременните химични бази данни, съвременните модели за бази данни и мета данни за наноматериали, използване на онтологии в базите данни, третиране на субстанциите в научен, индустриален и регулаторен аспект; • стандартни и съвременни методи за QSPR/QSAR моделиране, прилагане на приципите на OECD за създаване и валидиране на QSAR модели, изчисляване и селекция на молекулни дескриптори	03.2019 – 03.2020	Самостоятелна работа с научна литература; Консултации с научния ръководител; Отчет
2. Експериментална работа по темата на изследването: • Поставяне на цели и задачи на изследването: избор на базов модел за представяне на химични субстанции и нано-форми на субстанциите; • Избор на софтуерна платформа за реализация на модела за представяне на химични субстанции; • Избор на колекции с химични субстанции и нано материали, анализ на данните и мета данните, изчистване на аномалии, онтологично аотиране, импортиране в базата данни и подготовка за моделиране; • Избор на целеви свойства за моделиране; • Създаване на извадки за моделиране; • Създаване на първоначални QSPR/QSAR модели	06.2019 – 03.2020	Самостоятелна работа, лабораторна работа и работа чрез отдалечен достъп с компютърни ресурси; Отчет
3. Участие в научни форуми	03.2019 – 03.2020	Съвместно с научния ръководител; Отчет
4. Посещение на специализиращи курсове лекции, свързани с темата на дисертационния труд	03.2019 – 03.2020	Сертификати за преминато обучение
5. Представяне на годишен отчет на докторанта	03.2020	Отчет

Ръководител на катедра:.....

(доц. д-р Кирил Симитчиев)

Научен ръководител:.....

(доц. д-р Николай Кочев)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Форми
1. Експериментална работа върху темата на изследването: - Разработване на специализирани дескриптори за мултикомпонентни субстанции и наноматериали базирани на тяхната композиция и физико-химично охарактеризиране; - Разработване на метод за представяне на информацията за мултикомпонентни субстанции чрез линейна нотация; - Създаване на нови извадки за моделиране и нови QSPR/QSAR модели; - Тестване на създадените QSPR/QSAR модели върху бази данни със субстанции и откриване на перспективи за прилагането им при автоматично изчистване на грешки в базите данни; - Създаване на методика за QSPR/QSAR моделиране базирано на мултикомпонентния състав на субстанциите;	03.2020-09.2020	Самостоятелна работа, лабораторна работа и работа чрез отдалечен достъп с компютърни ресурси; Отчет
2. Работа над дисертацията: оформяне на експерименталната работа по разработените методи	08.2020-03.2021	Самостоятелна работа и консултации с научния ръководител Отчет
3. Полагане на изпит по специалността	09.2020-02.2021	Самостоятелна подготовка; консултации; Изпит
4. Участие в научни форуми	03.2020-09.2020	Съвместно с научния ръководител; Отчет
5. Преподавателска дейност провеждане на практически занятия със студенти, обучавани в ХФ на ПУ	03.2020-02.2021	Провеждане на курс упражнения/ практикуми със студенти; Проверка на курсови работи;
6. Посещение на специализиращи курсове лекции, свързани с темата на дисертационния труд	03.2020– 03.2021	Сертификати за преминато обучение
7. Подготовка на научна публикация	07.2020-03.2021	Съвместно с научния ръководител; Публикация
8. Представяне на годишен отчет на докторанта	03.2021	Отчет

Ръководител на катедра:.....

(доц. д-р Кирил Симитчиев)

Научен ръководител:.....

(доц. д-р Николай Кочев)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА ОТ ПОГДОГОВКАТА

Дейности	Период	Форми
1. Експериментална работа върху темата на изследването: - Усъвършенстване на дескрипторите за мултикомпонентни субстанции и наноматериали; - Усъвършенстване и валидиране на методиката за QSPR/QSAR моделиране базирано на мултикомпонентния състав на субстанциите; - Създаване на нови нано-QSAR модели и QSPR/QSAR модели базирани на мултикомпоненти субстанции; - Прилагане на моделите при решаване на проблеми свързани със създаването на нови субстанции според принципите „Safe-By-Design“ и регистрацията на субстанциите според регулаторните изисквания;	03.2021-09.2021	Самостоятелна работа, лабораторна работа и работа чрез отдалечен достъп с компютърни ресурси; Отчет; Публикации, участие в конференции
2. Преподавателска дейност провеждане на практически занятия със студенти, обучавани в ХФ на ПУ	03.2021-02.2022	Провеждане на курс упражнения/ практикуми със студенти; Проверка на курсови работи
3. Подготовка на научна публикация	09.2021-12.2021	Самостоятелна работа и консултации с научния ръководител; Публикация
4. Подготовка на цялостно оформения дисертационен труд	09.2021-03.2022	Самостоятелна работа и консултации с научния ръководител; Дисертационния труд
5. Отчисляване с право на защита	03.2022	Представяне на резултатите от дисертационния труд пред КС

Ръководител на катедра:.....

(доц. д-р Кирил Симитчиев)

Научен ръководител:.....

(доц. д-р Николай Кочев)

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

ДОКЛАД

от доц. д-р Нина Димчева
ръководител катедра Физикохимия

Уважаеми г-н Декан,

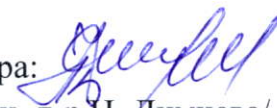
Моля да внесете за обсъждане и утвърждаване от Факултетния съвет на индивидуалния учебен план на докторант Мария Г. Пимпилова.

Планът е обсъден и приет на заседание на катедрения съвет на кат. Физикохимия в делови порядък от 15.03.2019.

Към настоящия доклад прилагам индивидуалния учебен план на докторантката, препис-извлечение от протокола на заседанието на КС и подписка на членовете на кат ФХ.

18.03. 2019 г.
Пловдив

Р-л. катедра:


/доц. д-р Н. Димчева/

Препис – извлечение

от заседание на кат. Физикохимия

ПРОТОКОЛ № 4

От заседание (в делови порядък)

на катедра Физикохимия

Общ състав: 8

Отсъства: ас. П. Кънчева (в майчинство)

Необходим брой за положителен избор: 5

На 15.03.2019 г. членовете на кат. Физикохимия на свое заседание (в делови порядък) обсъдиха и приеха единодушно индивидуалния учебен план на докторант Мария Генова Пимпилова.

КС предлага на ФС да бъде утвърден индивидуалния учебен план на докторант Мария Генова Пимпилова.

15.03.2019 г.

Протоколчик:

(М. Георгиева)



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ
"ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централна: (032) 261 261
Ректор: (032) 631 449 факс (032) 628 390 e-mail: rector@uni-plovdiv.bg

Х И М И Ч Е С К И Ф А К У Л Т Е Т

Катедра Физикохимия

ДОКТОРАНТУРА: редовна

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Име, презиме, фамилия на докторанта: Мария Генова Пимпилова
2. Дата на записване в докторантура 01.03. 2019 г.
3. Заповед № Р33-935 от 20.02.2019 година
4. Срок за завършване на докторантурата 01.03.2022 г.
5. Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика
професионално направление 4.2 Химически науки
докторска програма „ Физикохимия“
6. Тема на дисертационния труд: „Разработване и охарактеризиране на модифицирани електродни материали“, утвърдена от ФС, протокол № 205 от 14.02.2019 г.
7. Научен ръководител доц. д-р Нина Димитрова Димчева
8. Индивидуалният учебен план за работа е утвърден от ФС протокол №..... от

УТВЪРЖДАВАМ: РЕКТОР:

(проф. д-р З. Козлуджов)

ДЕКАН:

(доц. д-р В. Кметов)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА ОТ ДОКТОРАНТУРАТА

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 със специализиран електрохимичен софтуер, оформяне на научни съобщения и доклади Теория и практика на електрохимичното изследване ФД: Английски език за химици Подготовка и полагане на докторантски изпит по специалността (докторантски минимум)	Лекции 20 ч. Семинари 30 ч. СП 70 ч. Консултации, СП 120 ч. Сем. 30 ч. СП 30 ч. Консултации 40 ч. СП 260 ч.	Март-Май, 2019 г. Март- Юни, 2019 г. Март- май, 2019 г. Септември, 2019 г. – март 2020 г.	Моделна база данни с литературни източници Практически тест Сертификат Изпит пред комисия
II. Работа по дисертацията Литературна справка по темата на дисертацията; Овластяване на класическите и съвременни електрохимични методи Експериментална работа по изследователската тема	Сам. Работа 120 ч. Лаб. 50 ч., СП 250 ч. Консултации + Сам. Работа 750 ч.	Март, 2019 г.- Март, 2020 г. Май- Юли, 2019 г. Септ., 2019 г.- Март, 2020 г.	Тримесечни отчети Практически тест Тримесечни отчети
III. Педагогическа дейност Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 45 ч.	Септември,, 2019 г.- Март, 2020 г.	Лаб. Упражнения със студенти


 Ръководител катедра:

(доц. д-р Нина Димчева)


 Научен ръководител:

(доц. д-р Нина Димчева)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА ОТ ДОКТОРАНТУРАТА

Наименование на дейностите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. Обучение Специализираща дисциплина (Екологичен катализ/Биокатализ и биоелектрохимия)	Лек.+Сем. 60 ч. СП 90 ч.	Март, 2020 - февруари, 2021 г.	Изпит/ Сертификат
Теория и практика по изследователската тематика	Консултации СП 120 ч.	Март-Май, 2020 г.	Доклад пред КС
Факултативна дисциплина (Хроматографски методи)	Лек. 30 ч. СП 30 ч.	Март, 2020 г.- Март, 2021 г.	Сертификат
II. Работа по дисертацията Актуализиране на лит. обзор на дисертацията;	Сам. Работа 200 ч.	Март, 2019 г.- Март, 2020 г.	Тримесечни отчети
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации + Сам. Работа 1260	Септ., 2020 г.- Март, 2021 г.	Тримесечни отчети
III. Педагогическа дейност Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 45 ч.	Септември., 2020 г.- Март, 2021 г.	Лаб. Упражнения със студенти

Ръководител катедра: 

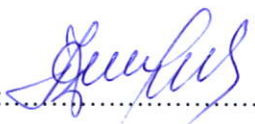
(доц. д-р Нина Димчева)

Научен ръководител: 

(доц. д-р Нина Димчева)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА ОТ ДОКТОРАНТУРАТА

Наименование на дейностите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване
I. Обучение Факултативен курс (Колоидна химия/ Приложна колоидна химия)	Лек. 30 ч. СП 30 ч.	Март, 2021 г.- Март, 2022 г.	Сертификат
II. Работа по дисертацията Финализиране на експерименталната работа по дисертацията; Научно-изследователски семинар Изготвяне на публикации по дисертационния труд; Изготвяне на докторска дисертация и защита	Консултации + Сам. Работа 950 ч. Сам. работа 90 ч. Консултации + Сам. Работа 100 ч. Консултации + Сам. Работа 600 ч.	Март, 2021 г.- януари, 2022 г. Март, 2021- януари, 2022 г. Март, 2021- януари, 2022 г. Януари – март, 2022	Тримесечни отчети Доклад пред КС Тримесечни отчети Предзащита и защита
III. Педагогическа дейност Провеждане на упражнения със студенти	Лаб. 30 ч.	април, 2021 – февруари 2022 г.	Лаб. Упражнения със студенти

Ръководител катедра: 

(доц. д-р Нина Димчева)

Научен ръководител: 

(доц. д-р Нина Димчева)

До Декана на ХФ
при ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

ДОКЛАД

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено на 15.03.2019 г., бе разгледан **отчетът на задочен докторант Ваня Йорданова Маркова за третата година от докторантурата ѝ**. На заседанието присъства един от двамата научни ръководители на докторанта – доц. д-р Кирил Симитчиев. Доц. д-р Кирил Симитчиев запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от втория научен ръководител инж. д-р Елка Пискова, и предложи оценка за третата година на докторантурата Много Добър (5). След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научните ръководители бяха приети с 11 гласа „за“.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчетът на Ваня Йорданова Маркова с оценка Много Добър (5).

Прилагам:

1. Препис-извлечение от катедрения съвет;
2. Отчет на докторанта;
3. Съгласувано мнение на научните ръководители.

15.03.2019 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”
от 15.03.2019

ПРОТОКОЛ № 4

На 15.03.2019 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 12

Присъстват 11

Отсъстват: доц. В. Стефанова – в командировка във връзка с КСК 2019

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Ваня Йорданова Маркова за третата година от нейната докторантура.

На заседанието присъства един от двамата научни ръководители на докторанта – доц. д-р Кирил Симитчиев. Той запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от втория научен ръководител инж. д-р Елка Пискова. След дискусията отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Много добър (5).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Ваня Йорданова Маркова за третата година от нейната докторантура с оценка Много добър (5).

15.03.2019

Протоколчик:

/П. Балабанова/

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

на
Ваня Йорданова Маркова
задочен докторант към катедра "Аналитична химия и Компютърна химия"
на Химически факултет

За трета година от докторантурата
(за периода 01.03.2018 – 01.03.2019 г.)

Тема на дисертационната работа: **„Изпитване на биоразградими отпадъци”**
Научни ръководители: доц. д-р Кирил Костов Симитчиев и
инж. д-р Елка Николова Пискова

През третата година от докторантурата бе извършена трансформация на формата на обучение (от редовна в задочна), считано от 01.01.2019 г. (Ректорска заповед № РЗЗ-6483/14.12.2018 г.). Във връзка с направената промяна бе извършена и актуализация на индивидуалния план за обучение, отчитащ четири годишната продължителност на задочната форма на обучение (Протокол № 204/15.01.2019 г. на ФС на ХФ). Изготвеният годишен отчет е съобразно индивидуалния план за работа, предвиден за третата година от докторантурата.

I. Обучение.

1. Посетих интензивен курс лекции на тема „Univariate Calibration on Instrumental Analysis“ с лектор Prof. Dr. Antonio Canals Hernandez, University of Alicante, Spain (15 май 2018, Химически Факултет на ПУ „Паисий Хилендарски, гр. Пловдив).
2. Посетих курс организиран от Съюза на метролозите в България на тема „Целева неопределеност – същност, установяване и приложение. Характеристики на методи за измерване и доказване на валидността им съгласно изискванията на БДС EN ISO/IEC 17025:2018 и международни документи по темата“, който се проведе на 01.11.2018 г. в гр. София.
Лекторът - д-р инж. хим. Димка Иванова, представи лекции на следните теми:
- Неопределеност на измерване – основни определения и концепции – прилагане по предназначение в лаборатории за изпитване и лаборатории за калибриране;

- Избор на източници и информация за определяне на целевата неопределеност съгласно Ръководство на Eurachem / CITAC „Установяване и използване на целевата неопределеност в химичните измервания“;
- Характеристики на метод за измерване и използването им за установяване на целевата неопределеност. Пригодност за целта;
- Оценка на риска при оценяване на съответствието във връзка с целевата неопределеност на измерване;
- Разходи / ползи, свързани с оценяване на неопределеността на измерване. Оптимизиране на неопределеността на измерване;
- Целевата неопределеност – ръководство при валидиране или верифициране на методи.

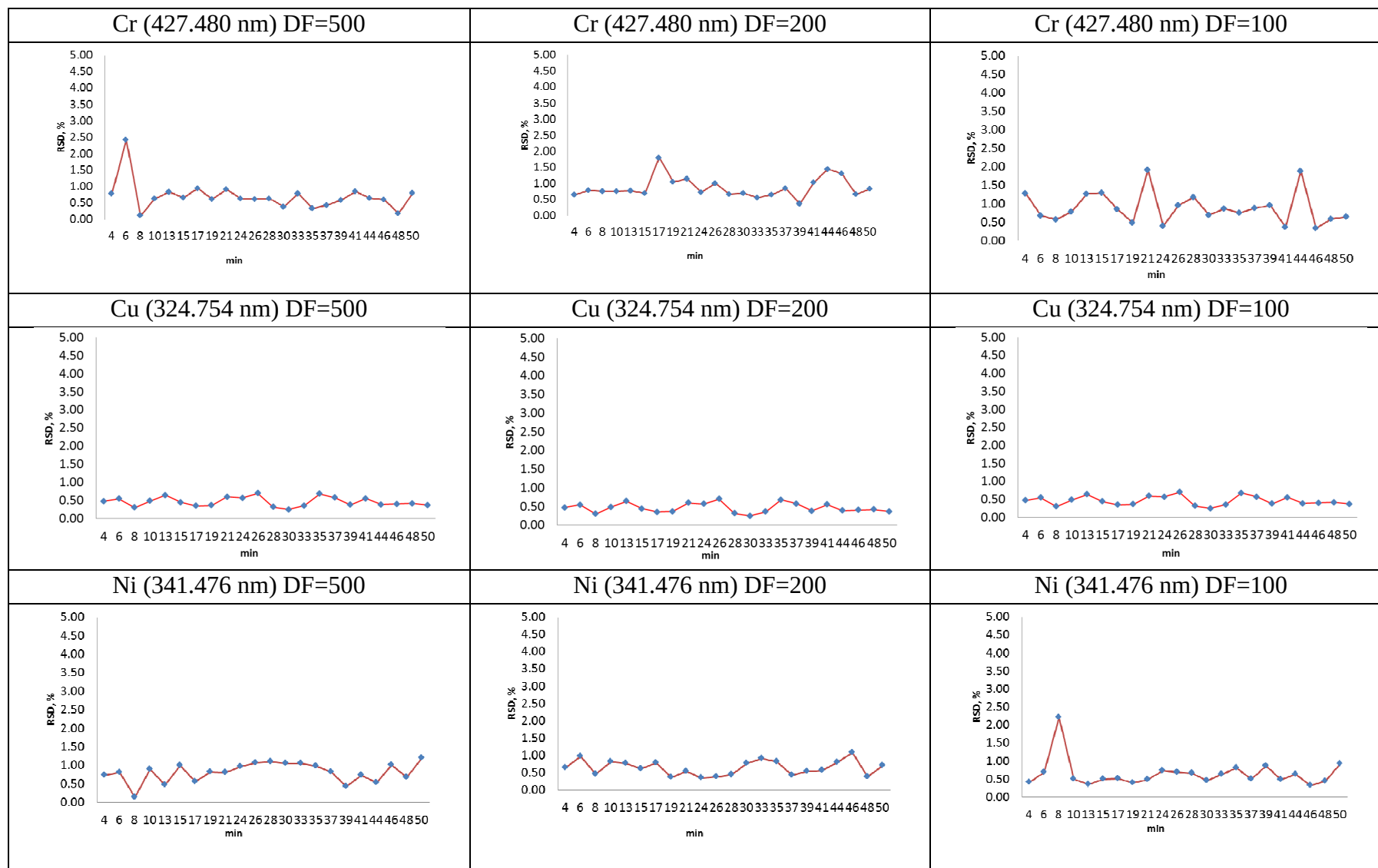
II. Работа по дисертацията.

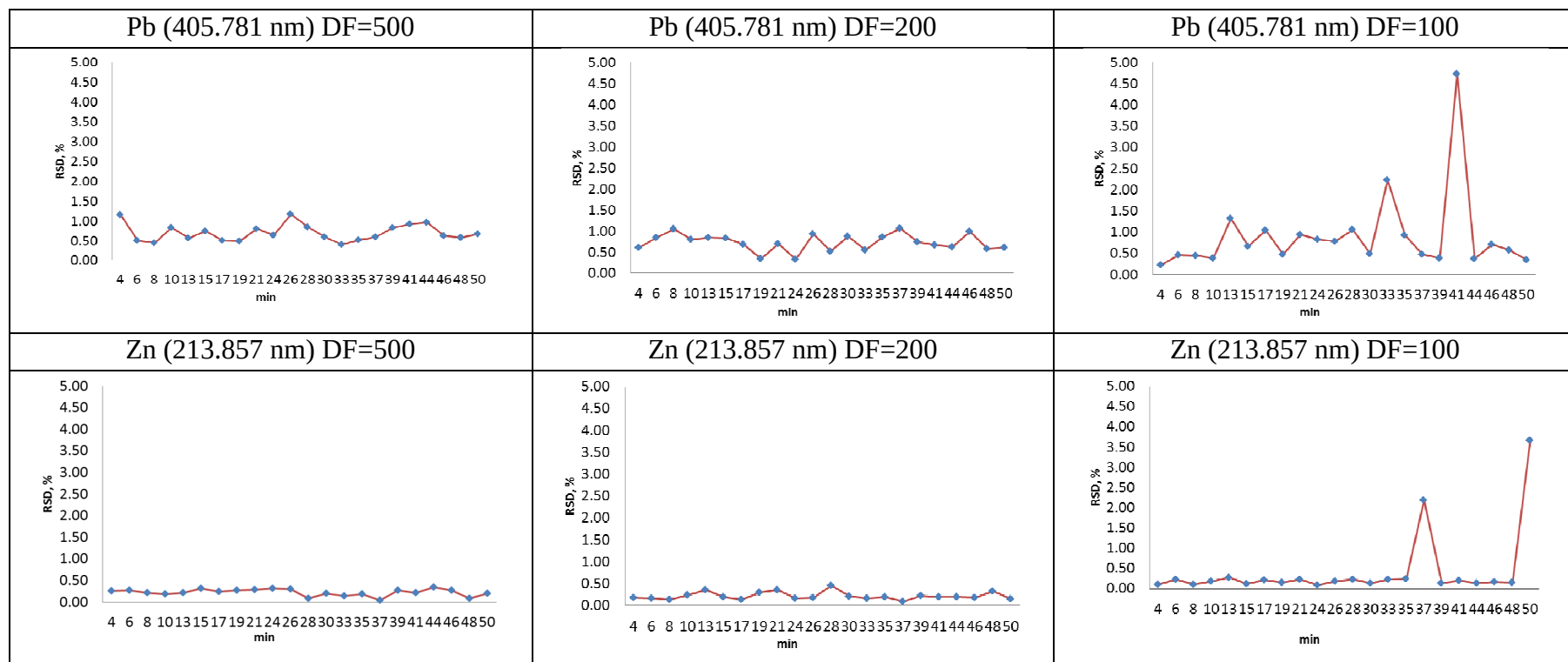
1. Оценка на толерантността (стабилността) на микровълновата плазма към различни фактори на разреждане на пробните разтвори

За определяне на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в продукти от биоотпадъци бе използвана атомно-емисионната спектрометрия с микровълново генерирана плазма (MP-AES). Тъй като целевите елементи са в ниски концентрации е необходимо да се измерват пробни разтвори с по-ниски фактори на разреждане. Направена е оценка на стабилността на микровълновата плазма спрямо различни фактори на разреждане за проба компост в продължение на 50 минути. Работните условия, при които са направени изследванията са: точка на оптично наблюдение – 0, скорост на потока на пробата - 1,0 ml/min, скорост на потока на пулверизиращия газ - 0,65 L/min, време за интегриране – 3 s, брой на инструменталните повторения – 5.

В началото на измерванията за фактор на разреждане 500 е отчетена скорост на потока на пробата 0,96 ml/min, а в края на серията – 0,92 ml/min. Тази промяна на скоростта е около 5 % и би могла да се дължи на стабилизиране на условията по транспортния път до камерата. При всички аналитични линии за този фактор на разреждане се наблюдава понижение на интензитета с 1 до 8 %, което се дължи на промяната на скоростта на потока на пробата. По време на цялата серия относителното стандартно отклонение се запазва постоянно (фигура 1). Отчетеното понижение на интензитета за втория изследван фактор на разреждане (DF=200) е от 1 до 2 %, като промяната на скоростта на потока на пробата е около 1 %. При фактор на разреждане 100 при всички изследвани линии се наблюдават флуктуации както на интензитета, така и на относителното стандартно отклонение по времето на измерването, което най-вероятно се дължи на отлагане на соли върху централния канал на горелката. При въвеждане на пробен разтвор с фактор на разреждане 50 още на четвъртата минута плазмата става нестабилна и не бе реализирано измерване.

За да могат да се използват по-ниски фактори на разреждане за измерване на аналитите е необходимо да се промива между отделните измервания, да се проверява дрейфа на интензитета със стандартни разтвори и да се измерва скоростта на потока на пробата преди и след серията.





Фигура 1 Инструментална повтoряемост при оценка на стабилността на микровълновата плазма спрямо различни фактори на разреждане на разтвори на проба компост

2. Изследване влиянието на матрични елементи върху плазмения фон при MP-AES анализ

Атомно-емисионната спектроскопия с микровълново генерирана плазма (MP-AES) е метод, при който е възможно да се наблюдават неспектрални пречения при анализа на проби с високо минерално съдържание. В предишни наши експерименти бе наблюдавано понижение или повишение на плазмения фон в разтворите на пробите, спрямо базовата линия на процедурната празна проба за изследваните аналитични линии.

С цел да се установи влиянието на съпътстващите елементи върху плазмения фон при MP-AES анализ бяха приготвени и подложени на инструментално измерване моноелементни разтвори на матричните елементи с нива, съпоставими с установените от предишни експерименти в реалните проби (Na и Mg – 50 mg/kg; K, Ca, Fe, Al, P и S – 100 mg/kg). При въвеждане в MP-AES на всеки от изброените разтвори на потенциални интерференти бе регистриран и проучен спектъра в близката околност на аналитичните линии на целевите елементи (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn). Резултатите от проведените изследвания са обобщени и представени в таблица 1.

Таблица 1. Влияние на макроелементите върху плазмения фон при анализа на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn

Аналитична линия, nm	Макроелементи, понижаващи плазмения фон	Макроелементи, повишаващи плазмения фон
Cd 226.502	K, Na	Ca, Fe, Mg, P, S
Cd 228.802	K, Ca, Mg, Al, P, S, Na	
Cr 359.348	K, Al	Ca, Fe, Mg, P, S
Cr 360.352	K, Na	Ca, Fe, P, S
Cr 427.480	K, Al, Na	Ca, Fe, Mg
Cr 520.844	K, Mg, P, S, Na	Ca, Fe, Al
Cu 324.754	K, Mg, S, Na	Fe, Al
Cu 327.3 5	K, Ca, Fe, Mg, Al, P, S, Na	
Ni 305.082	K, Ca, Mg, Na	Fe
Ni 341.476	K, Ca, Fe, Mg, Al, Na	
Ni 346.165	K, Ca, Mg, Al, Na	Fe, P, S
Ni 349.295	K, Mg, Al, S, Na	Fe
Pb 283.305	K, Al, Na	Fe, Mg, S
Pb 363.957	K, Mg, Al, P, S, Na	Ca, Fe
Pb 368.957	K, Ca, Mg, Al, P, S, Na	Fe
Pb 405.781	K, Mg, Al, P, S, Na	Ca, Fe
Zn 213.857	K, Ca, Fe, Mg, Al, Na	
Zn 472.215	Mg, Al	Ca, Fe
Zn 481.053	K, Mg, Al	Ca, Fe

От проведената качествена оценка е установено кои са интерферентите, които имат най-съществено влияние върху плазмения фон. В таблица 2 са посочени интерферентите за приоритетните линии на изследваните елементи.

Таблица 2 Интерференти имащи най-съществено влияние за приоритетните линии на анализите

Приоритетни линии на анализите	Интерференти с най-съществено влияние
Zn 213.857	Fe, Mg, Na
Cd 228.802	K, Ca, Al, Na
Cu 324.754	K, Na
Ni 341.476	K, Al, Na
Pb 405.781	K, Mg, Na
Cr 427.480	K, Fe, Na

3. Оценка на различни подходи за фонова корекция

За целите на анализа на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в третирани биоотпадъци (компост и стабилизирана органична фракция) чрез атомно емисионна спектрометрия с микровълнова азотно-генерирана плазма (MP-AES) бяха изследвани няколко подхода за корекция на спектралния фон. Температурата на микровълновата плазма е относително по-ниска от тази на индуктивно свързаната аргонска плазма, поради което при MP източника на възбуждане е по-вероятна появата на структуриран емисионен фон, както и промяна на нивото на фона, причинено от пробната матрица. Посочените два ефекта бяха наблюдавани при MP-AES измерване на разтворите, получени след разлагане на обработените биоотпадъци, поради което възникна необходимост от проучване на адекватността на използваните алгоритми за корекция на плазмения фон. Направено бе сравнение на подходите "on-peak", двустранна "off-peak" и едностранна "off-peak" корекция за следните емисионни линии: Cd I 228.802; Cd II 226.502; Cr I 427.480; Cr I 520.844; Cu I 324.754; Cu I 327.395; Ni I 341.476; Ni I 305.082; Pb I 405.781; Pb I 363.957; Zn I 213.857; Zn I 481.053. В допълнение бе оценен и диапазонът от дължини на вълната (1 или 3 CCD пиксела), който се взема под внимание при интегриране на регистрирания интензитет.

Проучените алгоритми за корекция доведоха до различни резултати само в случаите на Ni I 305.082 и Pb I 363.957. Въпреки това бе установено, че подходът one-sided/off-peak/3 pixels е подходящ и може да се приложи за всички изследвани аналитични линии. Важно е да се спомене, че изследвания подход "on-peak" не е интегриран в софтуера MP Expert на 4200 Agilent MP-AES, поради което всички необходими изчисления бяха извършени от нас посредством MS Excel. Последното затруднява прилагането на този вид корекция за рутинен анализ. Тъй като другите четири алгоритъма за "off-peak" корекция могат да се реализират чрез софтуера на 4200 Agilent MP-AES се препоръчва тяхното използване. Важен факт, който бе доказан, е че повторемостта на инструменталното измерване не се повлиява от използвания математичен модел за фонова корекция.

Част от резултатите са представени под формата на постер на тема „Оценка на подход за on-peak фонова корекция при MP-AES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и

Zn в стабилизирана органична фракция от битови отпадъци“ в семинар с международно участие на тема „Околна среда, медицина, наноматериали – иновативни методи за пробоподготовка и анализ“ (приложение 1). Също така бе оформена и подадена за публикуване статия „Assessment of different approaches for background correction in microwave plasma atomic emission spectrometry – case study for analysis of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb and Zn in treated bio-waste“ (приложение 2). Към момента, посочената статия е със статус – приета за отпечатване в списание Bulgarian Chemical Communications.

4. Сравнение на еднофакторна и многофакторна оптимизация на работните условия при MP-AES и ICP-OES анализ

За да се установят оптималните стойности на работните условия при MP-AES и ICP-OES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в обработени биоотпадъци, в предишни експерименти бе проведена еднофакторна оптимизация с моделни разтвори. Оптимизирани са следните фактори: скорост на потока на пробата, скорост на потока на пулверизация газ, точка на оптично наблюдение (само за MP-AES) и мощност на плазмения разряд (само за ICP-OES). С цел да се оценят основните влияещи фактори и смесени взаимодействия алтернативно бе приложена многофакторна оптимизация, като беше използван централно-композиционен план за планиране на експериментите. Двата подхода са сравнени и са получени оптимални стойности на оптимизираните параметри, от които са избрани компромисни стойности за провеждане на едновременен многоелементен анализ.

Резултатите са представени в постер на тема „One-factor-at-a-time vs multivariate optimization of MP-AES and ICP-OES analysis of target elements in treated biowaste“ в 11-та научна конференция по Химия с международно участие „11CC“ (приложение 3).

III. Педагогическа дейност.

1. През втори семестър (19.02 – 02.06.2018 г.) на учебната 2017/2018 година ръководих семинари по „Статистика и метрология в химията“ с хорариум 45 часа, на студенти от специалност Анализ и контрол I курс, редовно обучение.
2. В периода 04 – 06.02.2019 г. проведох семинари по „Статистика и метрология в химията“, на студенти от специалност Химия I курс, задочно обучение (15 h).

IV. Участие в научни форуми и публикации.

1. Взех участие в семинар с международно участие, съвместно организиран от фирма АСМ2 и Химическия Факултет при ПУ „П. Хилендарски“, на тема „Околна среда, медицина, наноматериали – иновативни методи за пробоподготовка и анализ“, който се проведе в ПУ „Паисий Хилендарски“ на 29.05.2018 г. Представих постер, който беше на тема „Оценка на подход за оп-reak фонова корекция при MP-AES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в стабилизирана органична фракция от битови отпадъци“.

2. Взех участие в 11-та научна конференция по Химия с международно участие „11СС“, организирана от Химическия факултет при ПУ „Паисий Хилендарски, която се проведе на 11-13 октомври 2018 година, гр. Пловдив. Участвах с постер, на тема „One-factor-at-a-time vs multivariate optimization of MP-AES and ICP OES analysis of target elements in treated biowaste”.

3. Оформена и подадена за публикуване е статия:

V. Markova, K. Simitchiev, Assessment of different approaches for background correction in microwave plasma atomic emission spectrometry – case study for analysis of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb and Zn in treated bio-waste, *Bulgarian Chemical Communications* (приета за отпечатване)

Препоръки:

Докторант:.....
Ваня Маркова

Научни ръководители:.....
доц. д-р Кирил Симитчиев

.....
инж. д-р Елка Пискова

Ръководител катедра:.....
доц. д-р Кирил Симитчиев

МНЕНИЕ

от доц. д-р Кирил Костов Симитчиев,
утвърдено от инж. д-р Елка Николова Пискова,
относно дейността на Ваня Йорданова Маркова,
докторант към катедра “Аналитична химия и Компютърна химия”
на Химически факултет при ПУ „Паисий Хилендарски“,
за периода 01.03.2018 – 01.03.2019 г.

През третата година от докторантурата на Ваня Маркова бе извършена трансформация на формата на обучение на докторанта (от редовна в задочна), считано от 01.01.2019 г. (Ректорска заповед № РЗЗ-6483/14.12.2018 г.). Във връзка с направената промяна бе извършена и актуализация на индивидуалния план за обучение на докторанта, отчитащ четиригодишната продължителност на задочната форма на обучение (Протокол № 204/15.01.2019 г. на ФС на ХФ). Настоящото мнение е базирано на съпоставката на извършените дейности от докторант Ваня Маркова за периода 01.03.2018 – 01.03.2019 г. и предвидените в обновения индивидуален план дейности за третата година на обучение на докторанта.

През третата година от докторантурата, Ваня Маркова изпълни успешно предвидените в индивидуалния план задачи, касаещи обучението на докторанта и провеждането на педагогическа дейност. Докторантът посети набор от обучителни лекции и семинари, имащи отношение към тематичното направление на дисертационния труд.

По отношение на преподавателската дейност, за отчетния период, докторант Маркова участва в провеждането на семинари по „Статистика и метрология в химията“ със студенти Бакалаври от специалности:

- Химия, I курс, задочно обучение (15 часа);
- Анализ и Контрол, I курс, редовно обучение (45 часа);

Докторант Маркова старателно и прецизно проведе експериментални изследвания по темата на дисертационния си труд, насочени към оптимизиране на методи за анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в обработени биоотпадъци, а именно:

- Приложено е моделиране на химичния експеримент (централно-композиционен план) за установяване на оптималните стойности на работните параметри при инструментален анализ чрез атомно-емисионна спектрометрия с микровълнова плазма (MP-AES Agilent 4200) и оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-OES Agilent 720);
- Оценена е толерантността (стабилността) на плазмения разряд на MP-AES при въвеждане на пробни разтвори с различни фактори на разреждане;
- Изследвано е влиянието на матрични елементи върху плазмения фон при анализ на целевите елементи чрез MP-AES;
- Проучени са различни подходи за фонова корекция при MP-AES анализ.

За периода, обхващащ третата година от докторантурата, Ваня Маркова самостоятелно подготви и представи два постера на научни форуми в България. През отчетната година бе подадена и приета за отпечатване една статия в списание с импакт фактор (*Bulgarian Chemical Communications*), в която докторанта е първи автор.

Като препоръка към докторанта искам да посоча, че е необходимо да се интензифицира работата както по провеждане на експерименталните изследвания, така и по текстовото оформяне на разделите на дисертационният труд.

В заключение може да се обобщи, че през изтеклата година, докторант Ваня Маркова е изпълнила в значителна степен дейностите, свързани с нейният дисертационен труд, поради което предлагам да и бъде дадена много добра оценка.

14.03.2019 г.

Научни ръководители:.....

доц. д-р Кирил Симитчиев

.....

инж. д-р Елка Пискова

До Декана
на Химически факултет
при ПУ „П. Хилендарски“
Тук

ДОКЛАД

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

Господин Декан,

На 14.03.2019 г. се състоя Катедрен съвет, на който беше разгледан годишния отчет за изпълнението на задачите за втората година от докторантурата на Благо Спасов Чучков, редовен докторант към катедрата с научна специалност “Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати”.

Ръководителят на докторанта проф. д-р Гинка Антова, представи своето мнение за дейността на Благо Чучков през втората година от докторантурата му.

След представяне на отчета и неговото обсъждане, членовете на катедрения съвет го приеха и гласуваха оценка: Добър (4).

Прилагам препис от протокола на Катедрения съвет.

15.03.2019 г.

Ръководител катедра ХТ:

(доц. д-р М. Ангелова-Ромова)



Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"

Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 122

от катедрено съвещание

Препис

Днес 14.03.2019 год. се състоя съвещание на кат. Химична технология.

Присъстваха: проф. д-р Г. Антова, доц. д-р М. Ангелова-Ромова, доц. д-р Г. Патронов, гл. ас. д-р Ж. Петкова, гл. ас. д-р И. Костова, ас. П. Янев, хим. Ж. Симеонова.

Отсъстваха: доц. д-р Д. Тончев – в неплатен отпуск, гл. ас. д-р О. Тенева – в платен отпуск.

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Учебни въпроси

Членовете на катедрения съвет разгледаха годишния отчет за изпълнението на задачите за втората година от докторантурата на Благо Спасов Чучков, редовен докторант към катедрата с научна специалност "Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати".

Ръководителят на докторанта проф. д-р Гинка Антова, представи своето мнение за дейността на Благо Чучков през втората година от докторантурата му.

След представяне на отчета и неговото обсъждане, членовете на катедрения съвет го приеха и гласуваха оценка: Добър.

Протоколирал:

(хим. Ж. Симеонова)

До Декана
на Химическия факултет
към ПУ „Паисий Хилендарски“
гр. Пловдив

Г о д и ш е н о т ч е т

на Благо Спасов Чучков
редовен докторант към катедра „Химична технология“
на Химически факултет
за втората година от докторантурата

Тема на дисертационната работа: *„Състав на остатъчни липидни продукти и влиянието им върху процеса на обработка на културална течност при получаване на антибиотика Salinomycin (Салиномицин)“*

Изготвеният годишен отчет е съобразно индивидуалния план за втората година от докторантурата (01.03.18 – 28.02.2019 г.).

I. Учебна дейност

1. Участие в семинар „Symbiosis of core-shell and fully porous particles: Implementing both for better HPLC and UHPLC results“ на Phenomenex, проведен в „Биовет АД“, гр. Пещера.

II. Работа, извършена по дисертационния труд

1. Определяне на показателя течливост на три продукта салиномицин.

В „Биовет АД“, гр. Пещера се произвеждат два продукта на основата на салиномицин с търговската марка Sасох[®]120 микрогранулат и Sасох[®]200 микрогранулат, съдържащи съответно 12% и 20% активна субстанция (натриева сол на салиномицина), калциев карбонат и силициев диоксид като носители. При получаването им се извършва процес на микрогранулация, което осигурява по-добра течливост на продукта. Получаването на салиномицин в „Биовет АД“ се осъществява чрез ферментация при използване основно на рапично и соево масло като културална среда, поради което образуваните агломерати с полиетерен антибиотик съдържат остатъчно количество липиди. Тези остатъчни липиди до някаква степен влияят върху качеството на крайните продукти и най-вече върху един от важните показатели – течливостта на продукта.

Изследвани по показателя течливост са три продукта на основата на салиномицин – два производство на „Биовет АД“ и един вносен от Китай. Установена е различна течливост на трите продукта – проба с добра течливост (80%), проба с лоша течливост (< 80%), произведени в „Биовет АД“ и проба с много добра течливост (> 80%), внос от Китай.

2. Екстрахиране на липидите от продукти, съдържащи салиномицин с различна течливост и определяне на груповия им състав чрез разделянето им на тънкослойна хроматография.

Остатъчните липиди от пробите с различна течливост бяха екстрахирани с хексан за 8 часа по метода на Соксле. Съдържанието на антибиотик в продуктите бе определено чрез високоефективна течна-течна хроматография.

Съдържанието на антибиотик и на остатъчните липиди, изолирани от изследваните продукти с различна течливост са представени в таблица 1.

Таблица 1. Съдържание на антибиотик и на остатъчни липиди, изолирани от продукти на основата на салиномицин с различна течливост

Продукти	Съдържание на антибиотик, %	Остатъчни липиди, %
Добра течливост (80%)	18,8	30,2
Лоша течливост (<80%)	18,6	40,5
Много добра течливост (>80%)	11,9	21,6

От данните се вижда, че с най-голямо съдържание на остатъчни липиди е пробата на салиномицин с лоша течливост, докато с най-малко е пробата с течливост над 80%. Установено е, че изследваните проби съдържат антибиотик салиномицин в количество от 11,9 до 18,8%. Резултатите за съдържанието на антибиотици в изследваните проби са в съответствие със сертификат за качество относно съдържанието на салиномицин в изследваните продукти с марка Sacoх®120 (внос от Китай) и Sacoх®200 микрогранулат (производство на „Биовет АД“). Пробата, отличаваща се с много добра течливост е с по-ниско съдържание на салиномицин.

Груповият липиден състав на рапичното масло и на изолираните остатъчни липиди беше определен чрез тънкослойна хроматография.

Рапичното масло, използвано като хранителна среда при получаването на салиномицин е със следния състав: триглицериди – 96,0%, неосапуняеми вещества – 1,7%, свободни мастни киселини – 0,5%, фосфолипиди и др. полярни компоненти – 1,2% и около 0,5% моно- и диглицериди.

Груповият състав на остатъчните липиди, изолирани от продуктите салиномицин с различна течливост е представен в таблица 2.

Таблица 2. Състав на остатъчните липиди, изолирани от проби салиномицин с различна течливост

Компоненти, %	Продукти на основата на салиномицин		
	Добра течливост (80%)	Лоша течливост (<80%)	Много добра течливост (>80%)
Моноглицериди	5,1	12,7	6,6
Диглицериди	8,3	14,8	8,7
Триглицериди	10,4	25,2	14,9
Свободни мастни киселини	14,0	1,4	14,7
Полярни съединения	62,2	45,9	55,1

Установени са значителни промени в липидния състав на изходното рапично масло и изолираните липиди от изследваните проби, протекли по време на процеса на биосинтез на салиномицина. Съдържанието на триацилглицероли значително намалява по време на процеса, докато това на моно-, диглицеридите и свободните мастни киселини се увеличава. В състава на остатъчните липиди, изолирани от пробите на салиномицин с добра и много добра течливост се наблюдава по-голямо количество на полярни съединения и свободни мастни киселини.

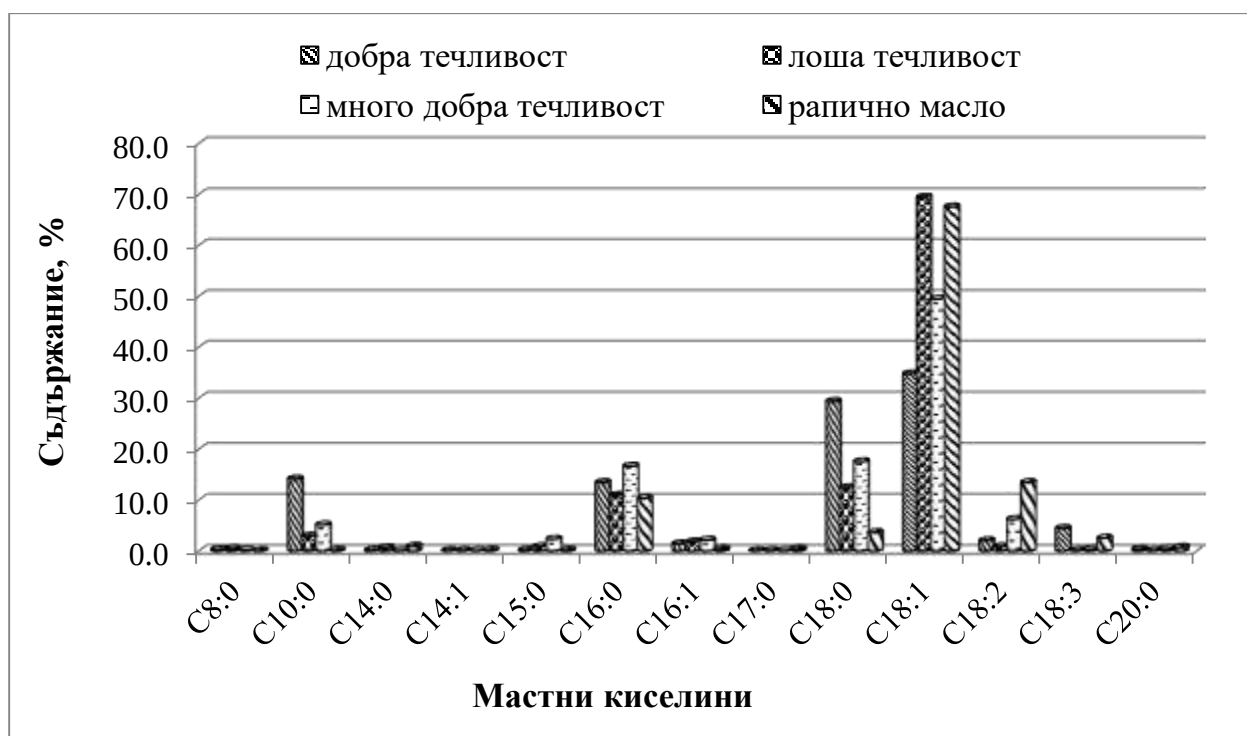
3. Общ мастнокиселинен състав на изолираните остатъчни липиди.

Определен е мастнокиселинния състав на общо изолираните липиди от пробите, съдържащи салиномицин с различна течливост. Промените в мастнокиселинния състав на изходното рапично масло и на изолираните остатъчни липиди са представени на фигура 1.

В процеса на биосинтез са установени значителни промени в мастнокиселинния състав на липидите, изолирани от пробите с различна течливост в сравнение с този на рапичното масло.

Олеиновата (67,5%) и линоловата (13,4%) киселина, следвани от палмитиновата (10,3%) и стеариновата (3,6%) киселина, доминират в мастнокиселинния състав на рапичното масло.

Олеиновата киселина преобладава в мастнокиселинния състав на изолираните остатъчни липиди от всички изследвани проби (в пробата с добра течливост тя е 34,7%, с много добра течливост – 49,4% и с лоша течливост – съответно 69,4%). Остатъчните липиди от различните проби съдържат палмитинова киселина между 10,9% (с лоша течливост) и 16,6% (с много добра течливост) и значително високо количество стеаринова киселина – между 12,4% (с лоша течливост) и 29,4% (с добра течливост).



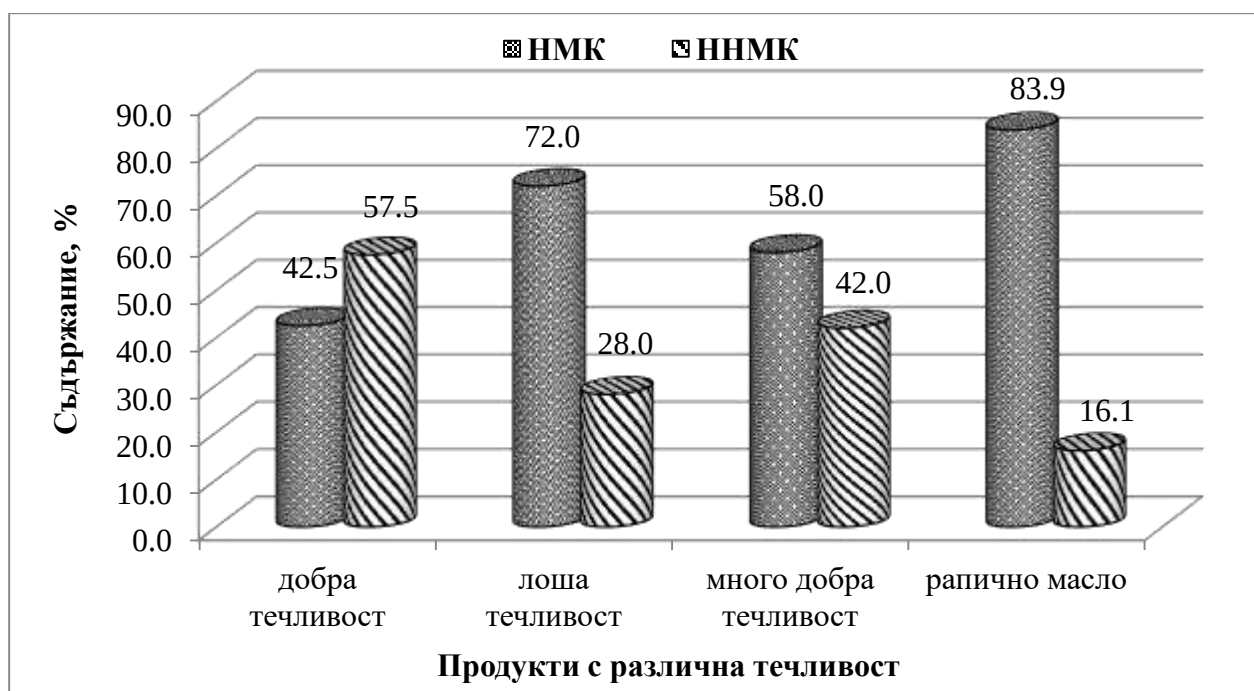
Фигура 1. Маснокиселинен състав на рапично масло и на остатъчните липиди, изолирани от продукт салиномицин с различна течливост

*C_{8:0} – каприлова, C_{10:0} – капринова, C_{14:0} – миристинова, C_{14:1} – миристолеинова, C_{15:0} – пентадеканова, C_{16:0} – палмитинова, C_{16:1} – палмитолеинова, C_{17:0} – маргаринава, C_{18:0} – стеаринова, C_{18:1} – олеинова, C_{18:2} – линолова, C_{18:3} – линоленова, C_{20:0} – арахидинова киселина

Количеството на ненаситените мастни киселини (олеинова и линолова) в маслата, изолирани от пробите с добра течливост е намаляло значително, за сметка на увеличеното съдържание на наситени мастни киселини – стеаринова, палмитинова и особено на капринова киселина (от 0,1% (в рапично масло) до 2,9 - 14,1% (в пробата с добра течливост)).

Фигура 2 показва съотношението на ненаситените и наситените мастни киселини в рапичното масло и остатъчните липиди, изолирани от салиномицин.

В състава на рапичното масло, използвано като хранителна среда, преобладават ненаситените мастни киселини (83,9%). В процеса на синтезиране на салиномицин, количеството им намалява значително. В остатъчните липиди, изолирани от салиномицин с добра и много добра течливост, количеството на ненаситените мастни киселини е съответно 42,5% (добра течливост) и 58,0% (много добра течливост). Количеството наситени мастни киселини нараства от 16,1% до 42,0% и 57,5% (с добра течливост).



Фигура 2. Съотношение между наситени (НМК) и ненаситени (ННМК) мастни киселини в рапичното масло и в остатъчните липиди, изолирани от продукт салиномицин с различна течливост

Съотношението на наситени : ненаситени мастни киселини в рапичното масло и изолираните липиди от пробата с лоша течливост е 16,1 : 83,9, (1 : 5,2) и 28,0 : 72,0, (1 : 2,6), докато в липидите на пробата с много добра течливост е много по-ниска 42,0 : 58,0, (1 : 1,4). По-ниско съдържание на ненаситени (42,5%) и съответно по-високо на наситени мастни киселини (57,5%) се установява в липидите, изолирани от пробата с добра течливост (1 : 0,7).

Може да се направи извод, че в процеса на биосинтез на салиномицин липидите претърпяват значителни трансформации – триацилглицеролите се хидролизират, като голяма част от дълговерижните ненаситени мастни киселини се разграждат до средно-верижни и по-низши наситени мастни киселини. Поради което се препоръчва при процеса на биосинтез на салиномицин използването на растителни масла с по-високо съдържание на наситени мастни киселини (палмитинова и стеаринова мастни киселини), което да осигури по-висока течливост и по-добро качество на крайния продукт.

4. Мастнокиселинен състав на основните компоненти в изолираните остатъчни липиди от изследваните проби салиномицин с различна течливост.

Определен е и мастнокиселинния състав на отделните компоненти (моноглицериди, диглицериди, триглицериди и свободни мастни киселини), влизащи в състава на изолираните липиди от пробите салиномицин с различна течливост.

Получените данни за мастнокиселинния състав на основните компоненти на липидите, изолирани от проба салиномицин с добра течливост са представени в таблица 3.

Таблица 3. Мастнокиселинен състав на основните компоненти, съдържащи се в липидите, изолирани от пробата салиномицин с добра течливост (80%)

* - не е идентифициран

МК	Моноглицериди, %	Диглицериди, %	Свободни мастни киселини, %
C _{8:0}	-	0,3	-
C _{10:0}	0,6	0,2	1,2
C _{14:0}	0,9	0,5	-
C _{15:0}	-	0,5	-
C _{16:0}	15,0	9,6	18,4
C _{16:1}	-	1,3	17,2
C _{17:0}	-	0,5	-
C _{18:0}	24,1	21,7	23,7
C _{18:1}	53,3	39,3	29,7
C _{18:2}	-	18,6	6,3
C _{18:3}	6,1	3,9	3,5
C _{20:0}	-	3,6	-

В диглицеридната фракция са идентифицирани 12 на брой мастни киселини, докато в другите две фракции са двойно по-малко. Основните мастни киселини са олеиновата (C_{18:1}), чието съдържание варира от 29,7% във фракцията свободни мастни киселини до 53,3% в диглицеридната фракция и стеариновата (C_{18:0}) от 21,7% в диглицеридите до 24,1% в моноглицеридната фракция. От наситените мастни киселини преобладава и палмитиновата (C_{16:0}) – от 9,6% в диглицеридите до 18,4% във фракцията свободни мастни киселини. Линоловата киселина (C_{18:2}) е идентифицирана в по-значително количество (18,6%) при диглицеридите, докато в моноглицеридите отсъства. В сравнение с мастнокиселинния състав на рапичното масло е установено почти двойно по-ниско съдържание на олеинова киселина в отделните фракции, но шесткратно увеличение на количеството на стеариновата киселина и 50%-но увеличение на количеството на палмитиновата киселина, т.е. по време на биосинтеза на салиномицина ненаситени мастни киселини се трансформират до наситени мастни киселини.

На фигура 3 е представено разпределението на мастните киселини по наситеност.



Фигура 3. Съотношение между наситени (НМК), ненаситени (ННМК), мононенаситени (МНМК) и полиненаситени (ПНМК) мастни киселини в основните фракции на липиди, изолирани от продукт салиномицин с добра течливост

От данните се вижда, че в отделните фракции преобладават ненаситените мастни киселини (в моноглицериди – 59,4 %; в диглицериди – 63,1% и в свободни мастни киселини – 56,7%). Основният дял от тях се пада на мононенаситените мастни киселини (от 40,6 до 53,3%). Количеството на полиненаситените мастни киселини във фракцията на диглицеридите (22,5%) е два–три пъти по-голямо от това във фракциите на моноглицеридите (6,1%) и на свободните мастни киселини (9,8%). Общото количество на наситените мастни киселини варира от 36,9% (диглицериди) до 43,3% (свободни мастни киселини).

Получените резултати за мастнокиселинния състав на основните компоненти на липиди, изолирани от пробата с лоша течливост (< 80%) са представени в таблица 4.

Таблица 4. Мастнокиселинен състав на основните компоненти, съдържащи се в липидите, изолирани от пробата салиномицин с лоша течливост (< 80%)

МК	Моноглицериди, %	Диглицериди, %	Триглицериди, %	Свободни мастни киселини, %
C _{14:0}	1,3	0,4	-*	0,4
C _{16:0}	17,6	19,0	24,0	14,1
C _{16:1}	-	0,4	-	-
C _{18:0}	20,3	15,2	6,7	17,6
C _{18:1}	52,2	60,7	49,7	65,3

C _{18:2}	-	3,8	19,6	1,9
C _{18:3}	8,6	0,5	-	0,7

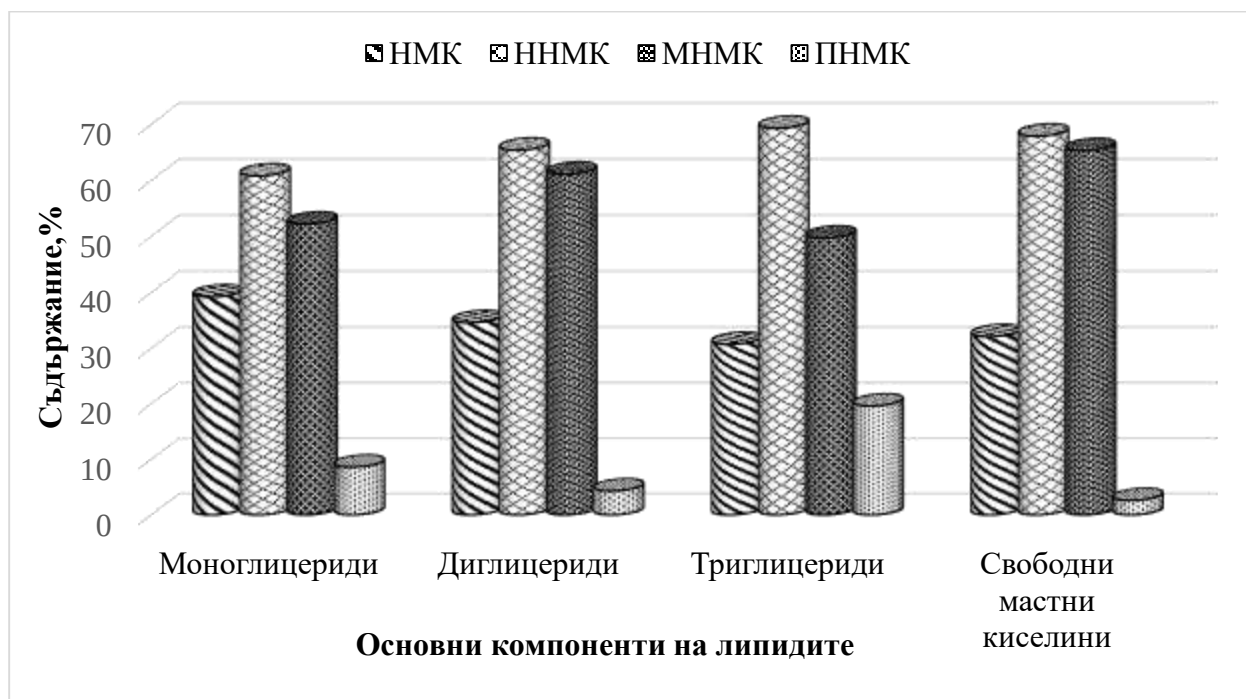
* - не е идентифициран

Във фракциите диглицириди и свободни мастни киселини са идентифицирани съответно 7 и 6 на брой мастни киселини, докато в другите две фракции (моно- и триглицериди) са по-малко на брой – съответно 5 и 4.

Основните мастни киселини в три от фракциите (моно-, диглицириди и свободни мастни киселини) са олеиновата, чието съдържание варира от 52,2% в моноглицеридите до 65,3% в свободните мастни киселини, стеариновата от 15,2% в диглициридите до 20,3% в моноглицеридната фракция и палмитиновата – от 14,1% във фракцията свободни мастни киселини до 20,3% в моноглицеридите. Лиоловата киселина в трите фракции (моно-, диглицириди и свободни мастни киселини) е идентифицирана в малко количество – от 0 % при моноглицеридите до 3,8% при диглициридите. В триглицеридната фракция преобладават олеиновата, лиоловата и палмитиновата киселина.

При сравнение с мастнокиселинния състав на изходното рапично масло е установено незначително намаляване на количеството на олеиновата киселина в отделните фракции, но 4-5 пъти увеличение на количеството на стеариновата киселина и двойно увеличение на количеството на палмитиновата киселина, т.е количеството на наситените мастни киселини в отделните фракции на липидите нараства.

На фигура 4 е представено разпределението на мастните киселини по наситеност.



Фигура 4. Съотношение между наситени (НМК), ненаситени (ННМК), мононенаситени (МНМК) и полиненаситени (ПНМК) мастни киселини в основните фракции на липиди, изолирани от продукт салиномицин с лоша течливост

От данните се вижда, че в отделните фракции преобладават ненаситените мастни киселини (моноглицериди – 60,8%; диглицериди – 65,4%; триглицериди – 69,3% и свободни мастни киселини – 67,9%). Основният дял от тях се пада на мононенаситените мастни киселини (от 49,7 до 65,3%). Количеството на полиненаситените мастни киселини във фракцията на триглицеридите (19,6%) е от 2 до 6 пъти по-голямо от това във фракциите на моноглицеридите (8,6%), диглицеридите (4,3%) и на свободните мастни киселини (2,6%). Общото количество на наситените мастни киселини варира от 30,7% (триглицериди) до 39,2% (моноглицериди).

Получените резултати за мастнокиселинния състав на основните компоненти на липиди, изолирани от проба с много добра течливост (> 80%) са представени в таблица 5.

Таблица 5. Мастнокиселинен състав на основните компоненти, съдържащи се в липидите, изолирани от пробата салиномицин с много добра течливост

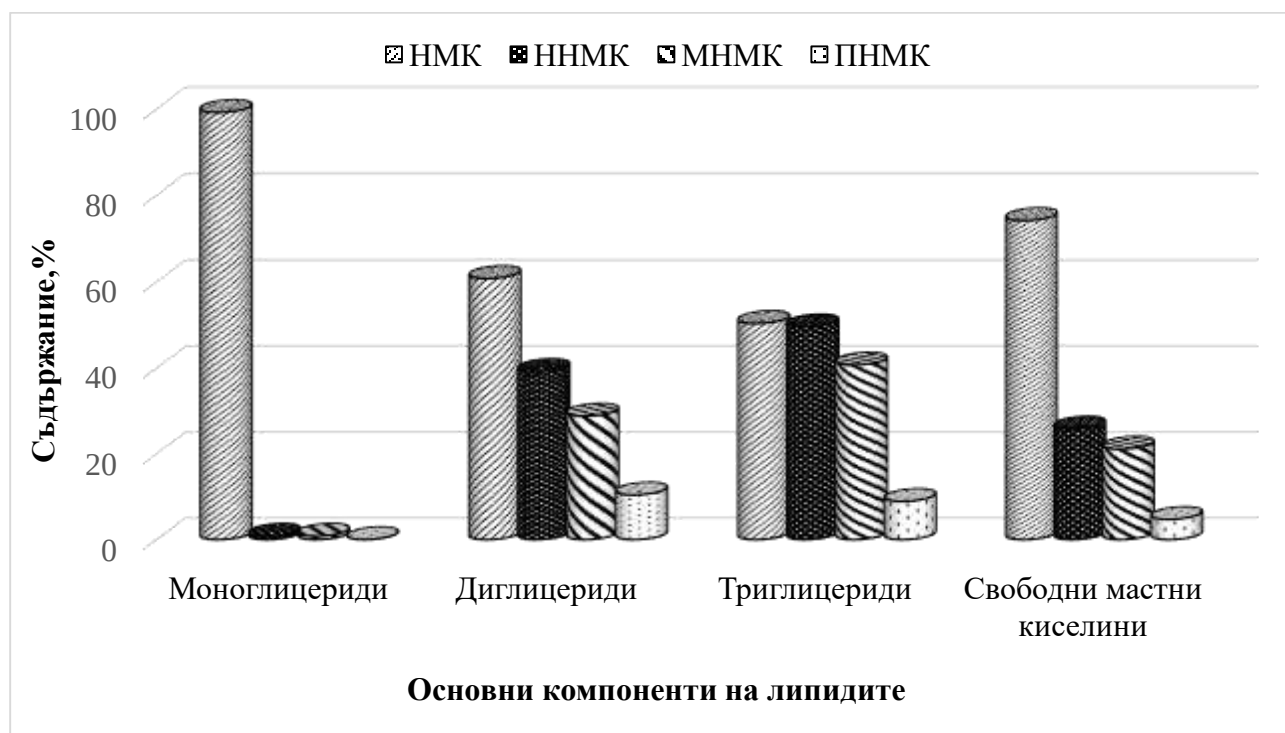
* - не е идентифицирано

МК	Моноглицериди, %	Диглицериди, %	Триглицериди, %	Свободни мастни киселини, %
C _{14:0}	3,9	-	5,6	-
C _{16:0}	27,4	22,8	11,5	25,2
C _{16:1}	-	-	4,9	
C _{18:0}	67,9	38,0	33,3	49,0
C _{18:1}	0,8	28,8	35,8	21,1
C _{18:2}	-	10,4	4,3	3,1
C _{18:3}	-	-	4,6	1,6

Във фракциите триглицериди и свободни мастни киселини са идентифицирани съответно 7 и 5 на брой мастни киселини, докато в другите две фракции (моно- и диглицериди) са само 4 на брой. Основните мастни киселини в три от фракциите (ди-, триглицериди и свободни мастни киселини) са стеариновата, чието съдържание варира от 33,3% в триглицеридите до 49,0% в свободните мастни киселини, олеиновата от 21,1% в свободните мастни киселини до 35,8% в триглицеридната фракция и палмитиновата – от 11,5% в триглицеридите до 25,2% във фракцията свободните мастни киселини. Линоловата киселина е в количество – от 3,1% (свободни мастни киселини) до 10,4% при диглицеридите. В моноглицеридната фракция преобладават стеариновата и палмитиновата киселина, олеиновата е представена в минимално количество (0,8%). При сравнение с мастнокиселинния състав на изходното рапично масло е установено многократно увеличение на количеството на стеариновата киселина, двойно увеличение на количеството на палмитиновата киселина, за сметка на намаляване количеството на олеиновата киселина, т.е. и при тази проба се наблюдава значително нарастване на количеството на наситените

мастни киселини в отделните фракции на липидите. В мастнокиселинния състав на липидите, изолирани от пробата салиномицин с много добра течливост е установено, че в по-голямо количество са идентифицирани наситените мастни киселини (стеаринова и палмитинова) в сравнение със състава на основните липидни фракции, изолирани от изследваните проби салиномицин с добра и лоша течливост.

На фигура 5 е представено съотношението между наситени, ненаситени, моно- и полиненаситени мастни киселини на основните фракции на липиди, изолирани от продукт салиномицин с много добра течливост.



Фигура 5. Съотношение между наситени (НМК), ненаситени (ННМК), мононенаситени (МНМК) и полиненаситени (ПНМК) мастни киселини в основните фракции на липиди, изолирани от продукт салиномицин с много добра течливост

От данните се вижда, че в отделните фракции преобладават наситените мастни киселини (моноглицериди – 99,2%; диглицериди – 60,8%; триглицериди – 50,4% и свободни мастни киселини – 74,2%). Общото количество на ненаситените мастни киселини в три от фракциите варира от 25,8% (свободни мастни киселини) до 49,6% (триглицериди), докато във фракцията на моноглицеридите са представени в минимално количество – под 1,0%. Основният дял от тях се пада на мононенаситените мастни киселини (от 21,1 до 40,7%), а количеството на полиненаситените мастни киселини варира от 4,7% (свободни мастни киселини) до 10,4% (диглицериди).

5. Изолиране на фосфолипиди от изследваните проби салиномицин с различна течливост и определяне на индивидуалния фосфолипиден състав.

Фосфолипидите са изолирани чрез екстракция по Фолч, пречистени от нежелани компоненти чрез утаяване със студен ацетон. Фосфолипидите се разделят с помощта на двупосочна тънкослойна хроматография. Индивидуалните фосфолипиди се минерализират при температура 180⁰С до получаване на елементарен фосфор. Количественото им определяне се извършва спектрофотометрично при $\lambda = 700 \text{ nm}$.

Получените данни за индивидуалния състав на фосфолипидите, изолирани от пробата салиномицин с добра течливост са представени в таблица 6.

Таблица 6. Индивидуален фосфолипиден състав на липиди, изолирани от проба салиномицин с добра течливост (80%)

Фосфолипиди	Съдържание, %
Фосфатидилхолин	31,2
Фосфатидилетаноламин	25,1
Фосфатидилинозитол	10,2
Лизофосфатидилхолин	21,5
Лизофосфатидилетаноламин	12,0

Във фосфолипидната фракция на липидите, изолирана от продукта салиномицин с добра течливост са идентифицирани само три от основните класове фосфолипиди – фосфатидилхолин, фосфатидилетаноламин и фосфатидилинозитол. Във фосфолипидната фракция преобладават фосфатидилхолинът (31,2%) и фосфатидилетаноламинът (25,1%). Наблюдава се и значително по-високо съдържание на лизоформите на фосфатидилхолина (21,5%) и фосфатидилетаноламин (12,0%) във фосфолипидите, изолирани от изследваната проба в сравнение със състава на фосфолипидната фракция на редица растителни масла. Най-вероятно това се дължи на протекли хидролизни процеси при биосинтеза на салиномицин, тъй като хранителната среда съдържа голямо количество вода, което е довело до получаването на високия процент хидролизни продукти.

Фосфолипидите от другите два продукта са изолирани и предстои определяне на индивидуалния им състав.

Участие в научни форуми и публикации

1. Участие в 11^{-та} научна конференция по химия с международно участие, организирана от Химическия факултет с постер „*Composition of residual lipids isolated from Salinomycin*“.
2. Bl. Chuchkov, G. Antova, „Composition of residual lipids isolated from Salinomycin“ – публикация приета за печат в *Bulgarian Chemical Communications*, Special Issue D, vol. 51, 2019.

III. Педагогическа дейност

1. Обучаване на студенти стажанти от специалност Медицинска химия, IV курс, провеждащи практиката си в „Биовет” АД, гр. Пещера в периода 08.05.2018 - 18.05.2018 г. по следната тема: „Определяне на концентрацията на активната субстанция в лекарствени продукти чрез високо ефективна течна хроматография (HPLC)”.

12.03.2019 г.

гр. Пловдив

Докторант:.....

/Благо Чучков/

Научен ръководител:.....

/Проф. д-р Г. Антова/

Ръководител катедра:.....

/Доц. д-р М. Ангелова-Ромова/

МНЕНИЕ

от проф. д-р Гинка Атанасова Антова,

относно дейността на редовен докторант Благо Спасов Чучков,

към катедра Химична технология, докторска програма “Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати”

През втората година от подготовката си (1.03.2018 – 28.02.2019 г.) докторант Благо Чучков е участвал в обучението на студенти от специалност Медицинска химия, провеждащи практиката в лабораториите на Биовет АД, гр. Пещера. Посетил е обучителен семинар по хроматография, организиран от Phenomenex и проведен в Биовет АД, гр. Пещера.

Докторантът продължи експерименталните изследвания по темата на дисертацията си, което включваше изследване състава на остатъчните липиди, изолирани от три продукта на основата на салиномицин с различна течливост, два производство на Биовет АД и един вносен от Китай. Основно изследванията бяха само върху груповия състав на липидите и мастнокиселинния състав на основните липидни компоненти. Една част от научната работа (определяне на активна субстанция и течливост на продукта) докторантът е проведе в лабораторията на Биовет АД, където работи. Поради служебната му ангажираност и появилите му се здравословни проблеми, при изпълнението на някои от заложените в индивидуалния план задачи се забелязва значително забавяне. Моята препоръка към докторанта е да отделя много повече време както за експериментална работа по дисертацията, така и да положи значителни усилия за допълване и оформяне на литературния обзор и за по-задълбочен анализ на получаваните резултати.

През този период докторантът участва в 11^{-та} научна конференция по химия с международно участие, организирана от Химическия факултет с постер „Composition of residual lipids isolated from Salinomycin“. Подадена за публикуване е статия, която е приета за печат в *Bulgarian Chemical Communications, Special Issue D*, vol. 51, 2019.

Предлагам за дейността през втората година на редовен докторант Благо Спасов Чучков да се даде оценка Добър (4).

12.03.2019 г.

гр. Пловдив

Научен ръководител:.....

(проф. д-р Г. Антова)

До Доц. д-р Веселин Кметов
Декан на Химически Факултет
при ПУ „П. Хилендарски“
Пловдив

ДОКЛАД

от доц. д-р Ваня Лекова

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Уважаеми доц. Кметов,

Моля да внесете във ФС на ХФ предложение на катедрения съвет :

- за приемане на годишния отчет на редовен докторант Златка Гарова за изпълнение на учебния план през втората година на обучение по докторска програма Методика на обучението по химия и;
- работата на докторанта за изпълнение на учебния план през втората година на обучение да бъде оценена с Добър 4.

Приложение:

1. Препис от протокол №173/05.03.2019 г.
2. Отчет на докторанта.
3. Преценка от научния ръководител, доц. д-р Йорданка Димова, за изпълнение на учебния план през втората година на обучение.

05.03.2019 г.

гр. Пловдив

С уважение:

/доц. Ваня Лекова/

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Препис извлечение
от заседание на катедра
ОНХМОХ
от 05.03.2019 г.

Протокол № 173

На 05.03.2019 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 7. Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Йорданка Димова, доц. д-р Петя Маринова, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева, гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 3: Годишен отчет на редовен докторант Златка Гарова за изпълнение на учебния план за втората година на обучение по докторска програма Методика на обучението по химия.

Доц. д-р Йорданка Димова, научен ръководител на докторант Златка Гарова, прочете преценката си по изпълнение на учебния план за втората година на обучение на докторанта. Предложена бе оценка Добър 4.

След проведено гласуване, катедреният съвет прие със седем гласа „за“ предложената оценка.

05.03.2019 г.
Пловдив

Протоколчик: 
/Милена Славова/

ОТЧЕТ

**за работата на Златка Христова Гарова – редовен докторант в
катедра „Обща и неорганична химия и методика на обучението по химия”
за периода 01.03.-31.12.2017 г. и 01.01.-01.03.2019 г.**

Редовна докторантура по област на висше образование 1. Педагогически науки, професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по..., докторска програма Методика на обучението по химия към катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия” на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски”.

Темата на дисертационния труд е „Обогатяване на научната грамотност на учениците чрез изследователска дейност в СИП по химия и опазване на околната среда”.

В табл. 1 е представено съотнасянето на плана за втората година на докторантурата с изпълнението на дейностите.

Таблица 1.

Сфери на дейност	План	Изпълнение
1. Научна дейност	1.1. Подготовка на основен педагогически експеримент	Създадох учебна програма за клуб по интереси „Нанохимия и нанотехнологии”; заедно с научния ми ръководител уточнихме дизайна на педагогическото изследване и инструментите за измерване на научната грамотност на учениците.
	1.2. Провеждане на основен педагогически експеримент, анализ и публикуване на резултатите.	Не успях да проведа основен експеримент през посочения период.
	1.3. Участие в научни форуми и публикуване на научни резултати	През 2017 г. участвах в конференции, в които представих резултати от дейността през първата година на докторантурата – постер (29-30.09.2017 г., Варна) и доклад (27-29.10.2017 г., Благоевград). През 2018 г. бяха публикувани две научни статии с мое участие.
2. Обучение	2.1. Курс „Психология”	Успешно положен изпит – 26.10.2017 г.
	2.2. Курс „Здравно образование”	Успешно положен изпит – 20.12.2017 г.
	2.3. Курс по англ. език	Получен сертификат за периода – 19.10.2016 г. – 14.06.2017 г.

	2.4. Курс „Теория и методология на химическото образование”	Успешно положен изпит докторантски минимум – 26.02.2019 г.
3. Пед. дейност	Учебни занятия със студенти	15 ч. упражнения по МОХ

1. Научна работа по плана за II година

1.1. Подготовка на основен педагогически експеримент

Създадох учебна програма за извънкласна и извънучилищна дейност на ученици в общински клуб по интереси „Нанохимия и нанотехнологии”. Учебната програма включва занятия – интерактивни лекции и упражнения под мое ръководство, организирани на срещи на ученици с учени в научни лаборатории във ФФ, ХФ и БФ на ПУ „П. Хилендарски”, в АУ-Пловдив, във ФФ на СУ „Св. Кл. Охридски”. В занятията ще участват 10 ученици от 9. и от 10. клас на СУ „Проф. д-р Ас. Златаров” и ПГСС „Васил Левски”, гр. Първомай.

Планирам експерименталното обучение да се реализира от средата на м. март до м. май 2019 г. Заедно с научния ми ръководител уточнихме дизайна на педагогическото изследване и инструментите за измерване на научната грамотност на учениците. Учениците ще участват във входящо и изходящо анкетиране с въпросника SUSSI – Разбиране на учениците за науката и научното изследване (Schwartz, Y., Lederman, N., & Lederman, J.) и с въпросника Познавателни интереси (Генджова, А.).

1.2. Не успях да проведа основен педагогически експеримент през посочения период по лични причини.

1.3. Участия в конференции и научни публикации

Участия в конференции

Участвах с постер в конференция „Природни науки – 2017“, организирана от ШУ „К. Преславски”, която се проведе на 29-30.09.2017 г. в гр. Варна. В постера (в съавторство с научния ми ръководител доц. Й. Димова) представих резултати от експерименталното обучение на 10 ученици от СУ „Проф. д-р Ас. Златаров“, гр. Първомай в есенно училище по нанонауки и нанотехнологии, организирано от Центъра за химични демонстрации на ХФ на ПУ „П. Хилендарски“ през учебната 2016/2017 г.

Участвах с доклад в 47. национална конференция на учителите по химия, организирана от ФХФ на СУ „Св. Кл. Охридски”, която се проведе на 27-29.10.2017 г. в гр. Благоевград. Докладът (в съавторство с доц. В. Нончева и доц. Й. Димова) представя резултати от проучване на разбирането на български гимназисти за същността на науката и научното изследване; докладът е публикуван в сп. *Химия, Природните науки в образованието*.

Статии

1. Зл. Гарова, В. Нончева, Й. Димова. Възгледи на български гимназисти за същността на науката и научното изследване. *Химия, Природните науки в образованието*. 27 (1), 2018, 26-36.

2. И. Хаджиали, Й. Димова, З. Гарова. Възгледи на български гимназисти за същността на науката и научното изследване – джандърен аспект. *Химия, Природните науки в образованието*. 27 (2), 2018, 185-196.

1.4. Допълнителни дейности

От 6 до 9 април 2017 година в гр. София се проведе 45. Национална конференция по въпросите на обучението по физика на тема „Експериментът – основа на образованието по физика”. Аз се включих в този форум заедно с две десетокласнички от СУ „Проф. д-р Асен Златаров”, гр. Първомай. Ученичките подготвиха и проведеха

работилница на тема „Изследване свойства на нанопротектори” и се представиха в Националната младежка научна сесия в рамките на конференцията.

От 23 до 26 май 2017 година в гр. Истанбул се проведе 26. Международен симпозиум и изложение на ученически проекти, организиран от фондация МЕФ (Международна фондация по природни науки). Проектът на тема „Синтезиране на цинков нанотор и влиянието му върху растителната култура – царевица”, бе представен от десетокласничките Аделина Аврамова и Миглена Ковачева. Двете ученички преди това участваха в есенното училище по „Нанонауки и нанотехнологии” и проявиха интерес към научно-изследователската дейност под ръководството на проф. Красимир Иванов, катедра Химия към Аграрен университет, гр. Пловдив. Проектът бе класиран на III място.

През месец юни 2017 г. планирах, организирах и проведох учебни занятия в лятно училище по нанохимия и нанотехнологии с 10 ученици от 9. и 10. клас на СУ „Проф. д-р Ас. Златаров”, гр. Първомай. Проведох входящо и изходящо тестиране и анкета с инструментариум SUSSI (Разбиране на учениците за науката и за научното изследване).

От 24 до 26 ноември 2017 година в гр. Кюстендил се проведе 16. Национално състезание по природни науки и екология. Проектът на тема „Синтезиране на цинков нанотор и влиянието му върху растителната култура – царевица”, бе представен от единадесетокласника Въчо Димитров и от дванадесетокласничката Мария Тозева. Въчо Димитров преди това участва в есенното училище по „Нанонауки и нанотехнологии” и прояви интерес към научно-изследователската дейност под ръководството на проф. Красимир Иванов, катедра Химия към Аграрен университет, гр. Пловдив. На Националното състезание учениците получиха отлична оценка (5.50), която им дава право да участват в класиране за постъпване във ВУЗ в България.

От 8 до 11 май 2018 година в гр. Истанбул се проведе 27. Международен симпозиум и изложение на ученически проекти, организиран от фондация МЕФ (Международна фондация по природни науки). Проектът на тема „Наноструктурирани полиелектролитни многослойни филми за контролирано освобождаване на лекарствени вещества”, бе представен от единадесетокласничките – Даяна Цветкова и Деница Илиева. Двете ученички преди това участваха в есенното училище по „Нанонауки и нанотехнологии” и проявиха интерес към научно-изследователската дейност под ръководството на доц. д-р Мария Марудова, Физически факултет към Пловдивския университет „Паисий Хилендарски”.

2. Обучение по плана за II година

2.1. В края на м. септември 2017 г. слушах лекции по когнитивна психология при проф. В. Василев (лекционен курс със студенти, задочно обучение, специалност „Психология”). Успешно защитих курсова работа.

2.2. Във връзка с обучението ми по дисциплината „Здравно образование” през м. декември 2017 г. слушах избрани лекции по Методика на обучението по биология и по Здравно образование при доц. М. Панайотова (лекционни курсове със студенти от магистърска програма „Учител по биология”). Успешно защитих курсова работа.

2.3. В периода 19.10.2016 г. – 14.06.2017 г. посещавах курс по английски език в „Univers”, ЕООД в гр. Първомай. За участието си получих сертификат.

2.4. Във връзка с обучението ми по дисциплината „Теория и методология на химическото образование” през месец май 2017 г. с доц. Е. Гергова и доц. Й. Димова проведох индивидуални консултации по теми от учебната програмата на курса. В периода януари – февруари 2019 г. имах индивидуални консултации с доц. Й. Димова, слушах избрани лекции със студенти от магистърска програма Учител по химия по

дисциплината Методика на обучението по химия. Успешно се представих на изпита – докторантски минимум, на 26.02.2019 г. В изпитната комисия участваха: доц. Лекова (ръководител на катедра ОНХ с МОХ), доц. Ел. Гергова и доц. Й. Димова.

3. Педагогическа дейност по плана за II година

На 13, 14 и 20 май 2017 г. проведох учебни занятия (15 ч. упражнения) със студенти от курса СДК „Учител по химия” (специалисти – зад. обучение), организиран от Департамента за квалификация и професионално развитие на педагогически специалисти към ПУ.

Подпис: 
(докторант Златка Гарова)

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

04.03.2019 г.
гр. Пловди

МНЕНИЕ

за дейността на докторант Златка Христова Гарова
от доц. д-р Йорданка Димитрова Димова –
научен ръководител на докторанта

Г-жа Златка Христова Гарова бе записана в докторантура на 01.03.2016 г. със заповед на Ректора на ПУ „П. Хилендарски“ № 333-957 от 26.02.2016 г.

При обсъждане на нейната дейност през първата година предложих *мн. добра оценка*, защото повечето от задачите по индивидуалния ѝ план за научна дейност и за обучението не бяха изведени докрай.

По плана за втората година докторант Зл. Гарова изпълни предимно дейности, свързани с обучението и с нейната педагогическа практика със студенти. В края на м. февруари 2019 г. тя успешно се представи на изпита - докторантски минимум, което бе най-важната ѝ задача в плана за първата година.

През втората година от докторантурата научната работа на докторант Зл. Гарова драматично се забави. Няма да повтарям какво е направила в тази област – има го описано подробно в нейния отчет, но обръщам внимание на факта, че това са все дейности, свързани с довършване на работата от плана за първата година. Най-важното, което *не е направено* в отчетния период (от 01.03. до 31.12.2017 г. и от 01.01. до 01.03.2019 г.) е, че не е проведен основният педагогически експеримент. Затова не мога да твърдя, че има значителен напредък в научната работа. Има, разбира се, надежда, че ситуацията ще се подобри, защото през месец януари 2019 г. най-сетне изкристализира проект за реализиране на педагогически експеримент, тече засилена подготовка и организация за стартиране на експериментално обучение в общински клуб по интереси „Нанохимия и нанотехнологии“.

Самокритично бих искала да отбележа, че за предходните две години не успях да повиша равнището на комуникацията с г-жа Гарова. Дори трябва да призная, че през календарната 2018 година, в която беше прекъсната докторантурата, комуникацията ни бе минимална, въпреки усилията ми да я поддържам.

Предлагам *добра* оценка за дейността на докторант Златка Гарова за втората година на докторантурата.

Подпис: 
(доц. д-р Й. Димова)

05.03.2019 г.
гр. Пловдив

До Доц. д-р Веселин Кметов
Декан на Химически Факултет
при ПУ „П. Хилендарски“
Пловдив

ДОКЛАД

от доц. д-р Ваня Лекова

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Уважаеми доц. Кметов,

Моля да внесете във ФС на ХФ предложение на катедрения съвет :

- за приемане на годишния отчет на редовен докторант Петя Герасимова за изпълнение на учебния план през първата година на обучение по докторска програма Методика на обучението по химия и;
- работата на докторанта за изпълнение на учебния план през първата година на обучение да бъде оценена с Много добър 5.

Приложение:

1. Препис от протокол №173/05.03.2019 г.
2. Отчет на докторанта.
3. Преценка от научния ръководител, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, за изпълнение на учебния план през първата година на обучение.

05.03.2019 г.

гр. Пловдив

С уважение:


/доц. Ваня Лекова/

Ръководител катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия

Препис извлечение
от заседание на катедра
ОНХМОХ
от 05.03.2019 г.

Протокол № 173

На 05.03.2019 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 7. Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Йорданка Димова, доц. д-р Петя Маринова, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева, гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 3: Годишен отчет на редовен докторант Петя Герасимова за изпълнение на учебния план за първата година на обучение по докторска програма Методика на обучението по химия.

Гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, научен ръководител на докторант Петя Герасимова, прочете преценката си по изпълнение на учебния план за първата година на обучение на докторанта. Предложена бе оценка Много добър 5.

След проведено гласуване, катедреният съвет прие със седем гласа „за“ предложената оценка.

05.03.2019 г.
Пловдив

Протоколчик: 
/Милена Славова/

Отчет

на Петя Иванова Герасимова –
редовен докторант в катедра „Обща и неорганична химия с
методика на обучението по химия“
за периода 1.03. 2018 г. – 1. 03. 2019 г.

Редовна докторантура по област на висше образование 1. Педагогически науки, професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по химия, докторска програма Методика на обучението по химия към катедра „Обща и неорганична химия и методика на обучението по химия“ на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“.

Тема на дисертационния труд „Развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет „Химия и опазване на околната среда – 8. и 9. клас“.

Зачислена съм в редовна докторантура на 01.03.2018 г. Реализираните дейности по работния план за I. година са както следва:

I. Научноизследователска дейност

1. През първата година от докторантската програма проучвах изследвания в областта на природните науки, свързани с формиране и развитие на ключови компетентности.

2. Съвместно с научният ми ръководител гл. ас. д-р Йорданка Стефанова обсъдихме и разработихме проект за провеждане педагогическо изследване. В съответствие с него разработихме анкета с цел проучване отношението и нагласите на учителите към проблема за формиране и развитие на ключови компетентности чрез обучението по природни науки. Съставихме и анкета за ученици, целта на която е да установи нивото на формиране на ключови компетентности у учениците от 9. клас в различни по вид училища и населени места. Предварителният педагогически експеримент към настоящия момент е проведен в четири средни училища на територията на общини: Асеновград, Марица, Кричим, Пловдив/район Тракия/, както и в Професионална гимназия по машиностроене - Пловдив, Хуманитарна гимназия „Св. св. Кирил и Методий“ - Пловдив, Математическа гимназия – Пловдив. Предварителният педагогически експеримент продължава. Предстои анализ на резултатите.

II. Обучение по плана за I година:

През първата година от докторантската програма съм посещавала курс „Психология“ , по който съм положила успешно изпит и курс „Педагогика“. Изпитът по Педагогика ще се проведе през месец май 2019 г.

1.03.2019 г.

Гр. Пловдив

Подпис



/докторант Петя Герасимова/

Научен ръководител:



Гл.ас. Йорданка Стефанова

МНЕНИЕ

за дейността на докторант Петя Иванова Герасимова
от гл. ас. д-р Йорданка Петрова Стефанова –
научен ръководител на докторанта

Г-жа Герасимова бе зачислена на 01.03.2018 г в докторантура по област на висше образование 1. Педагогически науки, професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по..., докторска програма Методика на обучението по химия към катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“ на Пловдивския университет „Паисий Хилендарски“. Темата на дисертационния труд е „Развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет „Химия и опазване на околната среда – 8. и 9. клас“.

През първата година от обучението съвместно с докторант Герасимова разработихме проект за провеждане на предварителен педагогически експеримент. В съответствие с него докторантката самостоятелно състави анкета с цел проучване мнението и нагласите на учителите от гр. Пловдив към проблема за формиране и развитие ключови компетентности чрез обучението по природни науки. Получени са емпирични данни, които предстои да бъдат обработени, анализирани и да бъдат формулирани съответните изводи. Получени са и емпирични данни и от анкетиране на ученици от училища в гр. Пловдив за установяване на нивото формираните ключови компетентности. Докторант Герасимова трябва да насочи усилията към анализа на получените резултати и съставяне на проект за провеждане на формиращ експеримент.

В съответствие с плана за обучение е необходимо докторант Герасимова да насочи усилията си към оформяне на резултатите от проучване на изследванията в областта на природните науки, свързани с формиране и развитие на ключови компетентности.

В периода ноември-януари докторант Герасимова посети курсове по Педагогика и Психология. Успешно положи изпит по Психология, а през май 2019 година предстои полагаането и на изпит по Педагогика.

Предлагам *мн. добра* оценка за дейността на докторант Петя Герасимова през първата година на докторантурата.

5.03. 2019 год.

гр. Пловдив

Подпис: 
гл.ас. д-р Стефанова

До Декана
на Химическия факултет
ТУК

ДОКЛАД

от проф. д-р Гинка Антова
Председател на комисията по атестиране
към Химическия факултет

Г-н Декан,

Моля да внесете за разглеждане във Факултетен съвет решенията на комисията по атестиране относно процедурата по атестиране на следните преподаватели:

1. За доц. д-р Румяна Иванова Бакалска комисията по атестиране:
 - предлага положителна оценка за учебната дейност.
 - предлага положителна оценка за научната дейност.
 - предлага положителна оценка за административната дейност.
 - разгледа и обсъди студентското мнение – студентите са оценили положително учебната и педагогическата дейност на доц. д-р Бакалска;
 - **предлага обща атестационна оценка – положителна.**
2. За гл. ас. д-р Кирила Трифонова Стойнова комисията по атестиране:
 - предлага положителна оценка за учебната дейност;
 - предлага положителна оценка за научната дейност;
 - предлага положителна оценка за административната дейност;
 - разгледа и обсъди студентското мнение – студентите са оценили положително учебната и педагогическата дейност на гл. ас. д-р Стойнова;
 - **предлага обща атестационна оценка – положителна.**

Прилагам: документите на атестираните преподаватели.

8 март 2019 год.

Председател на КА:



(проф. д-р Г. Антова)

ПРОТОКОЛ №17

от заседание на Комисията по атестиране

при Химически факултет

Днес, 8 март 2019 година се проведе заседание на Комисията по атестиране в състав:

председател: проф. д-р Гинка Атанасова Антова

членове: проф. д-р Васил Борисов Делчев

доц. д-р Петя Емилова Маринова

доц. д-р Николай Тодоров Кочев

доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов

Присъстват: 4, проф. Делчев е в командировка, прилага писмено мнение по процедурите за атестиране.

Дневен ред:

1. Разглеждане на документите за атестиране на преподавателите:

- доц. д-р Румяна Иванова Бакалска
- гл. ас. д-р Кирила Трифонова Стойнова

Комисията по атестиране разгледа представените от катедрите документи на преподавателите, подлежащи на атестиране.

След обсъждане на отчета на доц. д-р Румяна Иванова Бакалска, преценката на ръководителя катедра, препис-извлечението от протокола на катедра "Органична химия", мненията на студентите за преподавателската дейност и след разглеждане на представената научна продукция и документи за периода, комисията взе следното

РЕШЕНИЕ:

За доц. д-р Румяна Иванова Бакалска комисията по атестиране:

- предлага положителна оценка за учебната дейност.
- предлага положителна оценка за научната дейност.
- предлага положителна оценка за административната дейност.
- разгледа и обсъди студентското мнение – студентите са оценили положително учебната и педагогическата дейност на доц. д-р Бакалска;
- **предлага обща атестационна оценка – положителна.**

След обсъждане на отчета на гл. ас. д-р Кирила Трифонова Стойнова, преценката на ръководителя катедра, препис-извлечението от протокола на катедра "Обща и неорганична

химия с методика на обучението по химия”, мненията на студентите за преподавателската дейност и след разглеждане на представената научна продукция и документи за периода, комисията взе следното

РЕШЕНИЕ:

За гл. ас. д-р Кирила Трифонова Стойнова комисията по атестиране:

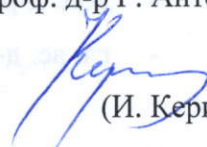
- предлага положителна оценка за учебната дейност;
- предлага положителна оценка за научната дейност;
- предлага положителна оценка за административната дейност;
- разгледа и обсъди студентското мнение – студентите са оценили положително учебната и педагогическата дейност на гл. ас. д-р Стойнова;
- **предлага обща атестационна оценка – положителна.**

Председател на комисията:



(проф. д-р Г. Антова)

Секретар на ХФ:



(И. Керина)

До Декана
на Химически факултет
при ПУ „Паисий Хилендарски“

Доклад

От доц. д-р Нина Димчева, р-л кат. Физикохимия

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание в делови порядък от 19.02. 2019 год. катедреният съвет на кат. Физикохимия взе решение да предложи на ФС на ХФ да назначи ас. Павел Певичаров на половин щат (4-часов работен ден) за срок от 18 месеца, считано от 01.03.2019 год. Назначаването на ас Певичаров за водене на упражненията по математика се налага, тъй като срочният договор на титуляра ас. Павлина Кънчева (в отпуск по майчинство), изтича на 01.03.2019 год. без възможност за неговото удължаване или подновяване.

Ас. Павел Певичаров понастоящем е назначен по чл. 68, ал. 1 (т. 3) на половин щат (4-часов работен ден) от 1.11.2018 год. и до момента изпълнява добросъвестно и отговорно преподавателските си задължения (провел е над 250 часа упражнения по математика със студенти от ХФ) и участва в работата на катедрата. Предложението ни е съгласувано с водещия лекционния курс по дисциплината – доц. д-р Николай Кочев.

Към настоящия доклад прилагам препис-извлечение от заседание (в делови порядък) на КС на кат. Физикохимия и подписка на членовете на катедрата.

Р-л катедра:



/доц. Н. Димчева/

19.02.2019 г.

Препис – извлечение

от заседание (в делови порядък)

на катедра Физикохимия

ПРОТОКОЛ № 3

Общ състав: 7

Отсъства: ас. П. Кънчева (в майчинство)

Необходим брой за положителен избор: 5

На 19.02.2019 г. членовете на кат. Физикохимия на свое заседание (в делови порядък) взеха решение да бъде назначен ас. Павел Певичаров за срок от 18 месеца на 4-часов работен ден, считано от 01.03.2019 год., поради изтичане на срочния договор на ас. Павлина Кънчева на 28.02.2019г.

Приложение:

1.Подписка на членовете на кат. Физикохимия, подкрепиха предложението за назначаването на ас. Павел Певичаров.

19.02.2019 г.

Протоколчик:

(М. Георгиева)

До членовете на ФС
на Химическия факултет

ДОКЛАД

от доц. д-р Веселин Кметов
Декан на Химическия факултет

Уважаеми членове на ФС,

Във връзка с обезпечаване на семинарните занятия по дисциплината Пласмент и пласментна политика за специалност „Химия с маркетинг“ през втория семестър на учебната 2018/2019 година, предлагам да бъдат хонорувани 15 часа упражнения на Гергана Димитрова Димитрова.

15 март 2019 год.

Декан на ХФ:

(доц. д-р В. Кметов)

Предложение

за структура на Общото събрание на Химическия факултет, което да се проведе на 16 април 2019 година.

Общ състав – 58 бр.

- академичен състав – 43 бр. (74 %)

- служители – 5 бр. – от всяка катедра

- студенти и докторанти – 10 бр. (8 студенти и 2 докторанти) (17 %)