ПРЕДЛОЖЕНИЯ
относно организацията на учебния процес в Химическия факултет

Във връзка със заповед на Ректора Р33-1503 / 08.05.2020 г. учебните занятия за специалностите от Химическия факултет да бъдат организирани, както следва:

1. От 13.07. (поради невъзможност за неприсъствено осъществяване) по график да се проведат **присъствени** лабораторни занятия със студенти от IV курс и от магистърски програми;
2. От 24.08. (поради невъзможност за неприсъствено осъществяване) по график да се проведат **присъствени** лабораторни занятия със студенти от I, II и III курс;
3. Присъствените лабораторни занятия да са в обем от 40% от експерименталните занятия;
4. Занятията в лабораториите да се осъществяват с групи от максимум 7 студенти при спазване на всички условия за безопазна работа и защита.

П Л О В Д И В С К И У Н И В Е Р С И Т Е Т
”ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”
България 4000 гр. Пловдив ул. “Цар Асен” № 24; Централа: (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

УТВЪРЖДАВАМ:

Декан:
(доц. д-р Веселин Кметов)

Ректор:
(проф. д-р Румен Младенов)

УЧЕБЕН ПЛАН

на специалност «Химичен анализ и контрол на качеството»
редовно обучение
образователно-квалификационна степен «Бакалавър»

Учебният план
е приет на Факултетен съвет с Протокол № .....
и одобрен от Академичния съвет с Протокол № .....
влиза в сила от учебната 2020/2021 год.

Факултет

Химически

Професионално направление

4.2. Химически науки

Специалност

Химичен анализ и контрол на качеството

Форма на обучение

редовно

Анотация

Химическият факултет предлага на студентите обучение в бакалавърска специалност „Химичен анализ и контрол на качеството" с продължителност четири години. Нарастващата нужда от висококвалифицирани аналитици, способни да създават и прилагат методи за анализ на разнообразни обекти и познаващи съвременните аналитични инструменти, които интензивно навлизат в аналитичните лаборатории у нас и в Европейския съюз предоставят на завършилите млади специалисти възможности за професионална реализация в изпитвателни, контролни и изследователски центрове.
Наред с фундаменталните знания по основните дялове на химичната наука: неорганична химия, органична химия, физикохимия и химични технологии, студентите ще придобият задълбочена теоретична и практическа подготовка по аналитична химия, включваща широк спектър от класически и инструментални методи за анализ прилагани в лабораторните изпитвания.
В учебния план е отделено специално внимание на запознаването на студентите със системи за контрол на качеството на химичните измервания, оценяване и представяне на аналитични данни, нормативни документи и регулации касаещи оптимизирането, валидирането и верифицирането на методи за анализ.
Обучението се базира на най-новите метрологични концепции и терминология. Представят се актуални норми, процедури, документи и организационни практики в съответствие с препоръките на националния орган по акредитация относно изискванията към лабораториите за получаване, обхват и поддържане на акредитация. Акцентира се върху процеса на хармонизиране с общоевропейските норми.
Мотивираните студенти имат възможност да получат стипендии за обучение в рамките на един семестър в европейски университети.
Фундаменталната подготовка по химия и придобитите знания и умения върху цялостния процес на химичен анализ и контрол на качеството са отлична предпоставка завършилите образователно-квалификационна степен „Бакалавър" да намерят професионална реализация в частни и държавни изпитвателни лаборатории или да продължат обучението си в широк спектър от магистърски програми.

Професионална квалификация

Химик - аналитик

Равнище на квалификация

Образователно-квалификационна степен: **„Бакалавър”**

Специфични изисквания за достъп (прием)

- Успешно класиране от кандидат-студентска кампания, организирана от Пловдивския университет, в която се включват по избор: кандидатстудентски изпит по Химия, Биология, Математика, Български език, Тест-събеседване по физика; или Оценка от държавен зрелостен изпит по: Химия и опазване на околната среда, Физика и астрономия, Биология и здравно образование, Математика, Български език и литература; или Оценка от национални и международни състезания по "Химия и опазване на околната среда", оценките от които се приравняват на резултатите от кандидат-студентски изпит по Химия;
- Платено обучение в случаите на предварително придобита диплома за висше образование, при наличие на свободен капацитет.

Ред за признаване на предходно обучение

- ECTS – координатор на Химическия факултет – проф. д-р Г. Антова; e-mail: ginant@uni-plovdiv.bg дава първоначална информация и насоки за възможностите за признаване и присъждане на кредити от предходно обучение, в зависимост от конкретния случай.
- ***Процедури за признаване:***

Първи вариант: Признаване на кредити на база представени документи (академична справка или диплома от предишно обучение) от друго ВУ;
Втори вариант: Признаване на кредити въз основа на представяне на официално издадени международни дипломи и сертификати за предхождащо обучение с пълно описание на наименованието на учебните дисциплини, хорариума и броя ECTS кредити.

Квалификационни изисквания и правила за квалификация

За придобиване на квалификацията са необходими 250 кредита, от тях 115 кредита от задължителни химически дисциплини; 68 кредита от специализиращи дисциплини в областта на методи за анализ и контрол; 41 кредита от интердисциплинарно обучение, 14 кредита от избираеми дисциплини, 2 кредита от факултативна дисциплина и 10 за държавен изпит (или дипломна работа).

Профил на програмата (специалността)

Учебният план включва 42 дисциплини, от които 32 завършват с изпит, а 10 с текуща оценка.
Обучителната програма е комбинация от две основни направления. Химическите дисциплини, формиращи базовото обучение (46 % от ECTS кредитите по специалността) са разделени в 5 основни дяла на химичното знание: Обща и неорганична химия, Органична химия, Аналитична химия, Физикохимия (вкл. Квантова химия и Колоидна химия) и Химични технологии (неорганични и органични). Вторият по значимост аспект на програмата се формира от допълнителни курсове, формиращи специализирани знания, които обхващат цялостния аналитичен процес и действащите общоевропейски платформи и

национални регламенти относно системи за управление и осигуряване на качеството и ефективността на аналитичната дейност. Този набор от дисциплини носи 68 кредита, което е 27,2 % от общия брой кредити.
Интердисциплинарното обучение съставлява 16,4 % от общия учебен план (41 ECTS кредита). В този образователен сегмент са включени дисциплини (математика, физика, компютърно обучение, химическа информатика, екология, английски език и спорт), които са необходими за усвояването на учебния материал по основните химически и специализиращи дисциплини.
Формирането на практически умения, необходими за самостоятелна работа в лаборатория се изграждат в рамките на семинарни занятия и лабораторни упражнения, които съставляват 54,4% от общата аудиторна заетост.
През 5, 6 и 8 семестър се изучават 4 избираеми дисциплини (14 кредита). Избираемите курсове са насочени към актуални проблеми и съвременно състояние на аналитичната методология и системите за контрол на качеството на химичните изпитвания. Списъкът на избираеми дисциплини се актуализира ежегодно от Факултетния съвет и съдържа поне две предложения за всеки курс, включен в учебния план.
В обучението е включена 1 факултативна дисциплина, която предоставя възможност на обучаемите да усъвършенстват чуждоезиковата си подготовка, да изучават философия или да се занимават със спорт.

Основни резултати от обучението

Програмно-специфични компетентности на завършилите специалисти

I. Базови химически

1. Познания върху важните принципи, теории, понятия и факти в химията и владеене на професионалния химичен език;
2. Практически умения за провеждане на химичен експеримент и познаване на правилата за безопасна работа в химична лаборатория;
3. Способност за оценка, интерпретация и обобщаване на химически данни и информация;
4. Способност за прилагане на тези познания за решаване на непознати проблеми;
5. Способност за наблюдение, контрол и документиране на различни химични процеси;
6. Способност за извличане и интерпретация на информация чрез химически експерименти;
7. Компютърни познания по операционни системи, бази данни и Интернет.

II. Специализиращи в областта на Химичен анализ и контрол на качеството

1. Познаване на правилата и подходите за набиране, подготовка и консервиране на проби от разнообразни реални обекти.
2. Практически знания и умения за прилагане на комбинирани методи за анализ на сложни обекти, съчетание на процедури за предварително разделяне и концентриране.
3. Базисни познания относно представянето, обработването, анализа и моделирането на информацията от аналитични измервания.
4. Практически умения за извършване на класически химичен анализ на органични и неорганични вещества.

5. Познаване на принципите на инструменталните методи за анализ: атомна и молекулна спектрометрия; електрохимични методи и хроматография.
6. Практически умения за работа със съвременния аналитичен инструментариум.
7. Основни познания по платформи и системи за контрол на качеството в аналитичните лаборатории.
8. Познаване на актуалните норми, процедури и документи относно получаване, обхват и поддържане на акредитация на изпитвателни лаборатории.

Професионален профил на завършилите

Обучаващите се по специалност „Химичен анализ и контрол на качеството“ за получаване на образователно-квалификационна степен „Бакалавър” се подготвят за следните области на дейност у нас и в чужбина:

- Като изпълнители, контрольори или одитори в структури на държавни органи на Министерството на околната среда и водите и Министерството на здравеопазването, оторизирани да извършват контролни функции;
- В контролни лаборатории на Изпълнителната агенция по околна среда, Българска агенция по безопасност на храните, Изпълнителната агенция по лекарства и др.;
- Във фирмени лаборатории контролиращи конкретни производствени процеси или окачествяващи готова продукция;
- В частни лабораторни комплекси за изпитване на химични, фармацевтични, биотехнологични, хранително-вкусови, индустриални и други продукти;
- В екипи осъществяващи научни и приложни изследвания в областта на химията, фармацевтиката, биотехнологиите, нанотехнологиите, екологията;
- В екипи за внедряване на експертни знания от световни лидери по развиване и внедряване на нови методи за анализ и контрол;
- Като одитори или консултанти за процедури на акредитация и надзор на действащи аналитични лаборатории.

Многобройните възможности за професионална реализация произтичат преди всичко от универсалната приложимост на комбинацията от получените фундаментални химически знания с широката практическа приложимост на компетенциите по анализ на разнообразни обекти и контрол върху цялостния процес на придобиване на аналитична информация.

Възможности за продължаване на обучението

Успешно завършилите студенти могат да продължат обучението си за получаване на образователно-квалификационна степен “Магистър”, в областта на аналитичната дейност в програма по „Спектрохимичен анализ“ или по други магистърски програми в Химическия факултет на Пловдивския университет.
Дипломираните Бакалаври могат да продължат образованието си във всички висши училища в Република България, които провеждат обучение в професионално направление 4.2. Химически науки.
При желание студентите, завършили бакалавърската програма могат да продължат образованието си в магистърски програми в друго професионално направление във висши училища в страната или в чужбина.

Диаграма на структурата на курсовете с кредити
за специалност Химичен анализ и контрол на качеството
редовно обучение

№	Учебен курс/дисциплина	Аудиторни				Извън-аудиторна	Общо	К	Фи
		АО	Л	С	Лб	ИА	О		
	1-ви семестър								
1	**Обща и неорганична химия – I част**	120	60	0	60	180	300	10	И
2	**Математика**	90	45	0	45	180	270	9	И
3	**Обща физика**	60	30	0	30	150	210	7	И
4	**Английски език**	30	0	30	0	30	60	2	Т
5	**Спорт**	30	0	0	30	30	60	2	Т
Общо за 1-ви семестър		330	135	30	165	570	900	30	
	2-ри семестър								
1	**Обща и неорганична химия – II част**	120	60	0	60	210	330	11	И
2	**Статистика и метрология в химията**	75	30	45	0	105	180	6	И
3	**Подбор, съхранение и подготовка на проби за анализ**	75	45	0	30	105	180	6	И
4	**Компютри и софтуер**	60	30	0	30	90	150	5	И
5	**Спорт**	30	0	0	30	30	60	2	Т
Общо за 2-ри семестър		360	165	45	150	540	900	30	
Общо за I-ва година		**690**	**300**	**75**	**315**	**1110**	**1800**	**60**	
	3-ти семестър								
1	**Аналитична химия – I**	135	45	0	90	165	300	10	И
2	**Органична химия – I**	105	45	15	45	165	270	9	И
3	**Химическа информатика**	60	30	0	30	90	150	5	И
4	**Квантова химия**	45	30	0	15	75	120	4	И
5	**Спорт**	30	0	0	30	30	60	2	Т
Общо за 3-ти семестър		375	150	15	210	525	900	30	
	4-ти семестър								
1	**Органична химия – II**	120	60	15	45	180	300	10	И
2	**Аналитична химия – II**	135	45	0	90	165	300	10	И
3	**Методи за разделяне и концентриране в химичния анализ**	60	30	0	30	180	240	8	И
4	**Спорт**	30	0	0	30	30	60	2	Т
Общо за 4-ти семестър		345	135	15	195	555	900	30	
Общо за II-ра година		**720**	**285**	**30**	**405**	**1080**	**1800**	**60**	
	5-ти семестър								
1	**Физикохимия – I**	105	45	15	45	135	240	8	И

2	**Атомен спектрален анализ**	105	45	0	60	135	240	8	И
3	**Хемометрия**	60	30	0	30	90	150	5	И
4	**Анализ на храни**	60	30	0	30	90	150	5	И
5	**Избираема дисциплина I**	30	30	0	0	30	60	2	Т
6	**Факултативна дисциплина**	30	0	30	0	30	60	2	Т
Общо за 5-ти семестър		390	180	45	165	510	900	30	
	6-ти семестър								
1	**Физикохимия – II**	105	45	15	45	135	240	8	И
2	**Молекулен спектрален анализ**	90	45	0	45	120	210	7	И
3	**Биоорганична химия**	75	30	0	45	105	180	6	И
4	**Контрол и управление на качеството на химичните изпитвания**	90	45	45	0	120	210	7	И
5	**Избираема дисциплина II**	30	30	0	0	30	60	2	Т
Общо за 6-ти семестър		390	195	60	135	510	900	30	
Общо за III-та година		**780**	**375**	**105**	**300**	**1020**	**1800**	**60**	
	7-ми семестър								
1	**Хроматографски анализ**	75	30	0	45	105	180	6	И
2	**Органичен анализ**	75	30	0	45	105	180	6	И
3	**Атмосферна химия**	45	30	15	0	105	150	5	И
4	**Приложна неорганична химия**	60	30	0	30	90	150	5	И
5	**Електрохимични методи за анализ**	60	30	0	30	90	150	5	И
6	**Колоидна химия**	45	30	0	15	45	90	3	И
Общо за 7-ми семестър		360	180	15	165	540	900	30	
	8-ми семестър								
1	**Приложна органична химия**	60	30	0	30	90	150	5	И
2	**Екология и опазване на околната среда**	60	30	0	30	90	150	5	И
3	**Химия на полимерите**	60	30	0	30	90	150	5	И
4	**Нормативни документи и регулации при анализ и контрол**	60	30	30	0	90	150	5	И
5	**Избираема дисциплина III**	60	30	0	30	90	150	5	Т
6	**Избираема дисциплина IV**	60	30	0	30	90	150	5	Т
Общо за 8-ми семестър		360	180	30	150	540	900	30	
Общо за IV-та година		**720**	**360**	**45**	**315**	**1080**	**1800**	**60**	
Общо за целия курс на обучение:		**2910**	**1320**	**255**	**1335**	**4290**	**7200**	**240**	
Форма на дипломиране:		Държавен изпит по химия (писмен) или защита на дипломна работа				300		10	
Общ брой кредити:		**250**							

Легенда:

Аудиторни часове в семестъра:	**АО** – общ брой, от тях **Л** – за лекции; **С** – за семинарни (упражнения); **Лб** – лабораторни упражнения.
Извънаудиторни часове в семестъра:	**Сп** – за самостоятелна подготовка
Други означения	**О** – общ брой часове (АО+Сп); **К** – ECTS кредити; **Фи** – форма на изпитване (със стойности ***И*** – изпит, ***Т*** – текуща оценка).

Правила за изпитите, оценяване и поставяне на оценки:

Всички изпити са писмени и се провеждат в рамките на сесията след края на семестъра. Формата на провеждане на изпита зависи от спецификата на дисциплината и може да бъде:

- писмена работа върху обявен изпитен конспект;
- тест, включващ активни или пасивни въпроси;
- решение на проблем или задачи.

За всяка дисциплина се обявяват най-малко две допълнителни дати за изпит.
През семестъра се провеждат колоквиуми, контролни или курсови работи, които са съобразени със спецификата на изучаваните дисциплини и са обявени в съответната учебната програма на курса. Чрез осъществяване на текущ контрол в рамките на семестъра се създава възможност студентите да организират по-добре времето си и да усвоят задълбочено изучаваната материя.
Критериите за формиране на оценката, както и степента на тежест, с която резултатите от текущ контрол се включват в крайната оценка, зависят от спецификата на изучаваната дисциплина и се обявяват в учебната програма.
Студентите могат да се запознаят с резултатите от всяка писмена работа (изпитна или от текущ контрол) и да получат мотивираното мнение на оценяващия преподавател.
Писмените материали от проверката на знанията и уменията се съхраняват за срок не по-малък от една година от провеждането на изпита.
Държавните изпити и защитите на дипломни работи се провеждат от Държавна изпитна комисия, назначена със заповед на Ректора.

Изисквания за завършване:

Успешно положен писмен Държавен изпит или защита на Дипломна работа

Директор (или отговорник) на програма:

Декан на Химически факултет доц. д-р Веселин Кметов
Телефон: 032/ 261 402 e-mail: kmetov@uni-plovdiv.bg

До Г-н Декана
на Химически факултет
в ПУ "Паисий Хилендарски"
Тук

Д О К Л А Д

от проф. д-р Гинка Антова,
зам. декан по учебната дейност

Господин Декан,

Във връзка с невзети изпити по Клинична химия (с лектор проф. Т. Цветкова) на семестриално завършили студенти от специалност Медицинска химия, обучавани по учебен план 2016/2017 г., предлагам да внесете за разглеждане и утвърждаване от Факултетния съвет на комисия за провеждане на изпита, в следния състав:

1. Доц. д-р Веселин Йорданов Кметов – декан на ХФ
2. Доц. д-р Кирил Костов Симитчиев – преподавател по дисциплината "Клинични аналшзи"
3. Д-р Деляна Митева Давчева – асистент в кат. Клинична лаборатория

10.03.2020 г.

Зам. декан по учебната дейност: .....
/ проф. д-р Г. Антова/

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

Д О К Л А Д

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 предложението на катедрения съвет за изваждане от списъка с избираеми и факултативни дисциплини, считано от учебната 2020/2021 г както следва:

- **Факултативни дисциплини**

***Рефлексия и личностно развитие, хорариум* 0/30/0**
Редовно обучение – ОКС „Бакалавър“, за специалности: Химия, Медицинска химия, Химия с маркетинг, Компютърна химия, Анализ и контрол;
***Рефлексия и личностно развитие, хорариум* 0/15/0**
Задочно обучение– ОКС „Бакалавър“, за специалност Химия.
***Рефлексията в обучението, хорариум* 15/0/0**
Редовно обучение – ОКС „Магистър“, за специалност Обучението по химия в училище;
***Рефлексията в обучението, хорариум* 10/0/0**
Задочно обучение – ОКС „Магистър“, за специалност Обучението по химия в училище
Задочно обучение (неспециалисти) – ОКС „Магистър“, за специалност Обучението по химия в училище.

- **Избираеми дисциплини**

***Рефлексията в обучението по химия, хорариум* 30/0/0**
Редовно обучение – ОКС „Бакалавър“, за специалност Биология и химия (Биологически факултет);
***Рефлексията в обучението по природни науки, хорариум* 30/0/0**
Редовно обучение – ОКС „Бакалавър“, за специалност Обучение по природни науки в прогимназиалния етап на училищното образование (Физико-технологичен факултет).

Имайки предвид, че студентите от специалност Химия, задочно обучение, за първия семестър на учебната 2020/21 г., вече са избрали дисциплината ***Рефлексията в обучението***, то катедрата поема отговорността да я преподава за посочения семестър на учебната 2020/21 г..

Приложение:
Препис от протокол №186/10.03.2020 г.

10.03.2020 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 10.03.2020 г.

Протокол № 186

На 10.03.2020 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 8.

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 и гл. ас. д-р Павел Янев

Отсъства 1: гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 1. Учебни въпроси

Доц. Димова прочете дисциплините, които предлага да бъдат извадени от списъка с избираемите и факултативни дисциплини за ОКС „Бакалавър“ и ОКС „Магистър“, редовно и задочно обучение, считано от учебната 2020/21 г., за студентите обучавани в Химическия, Биологическия и Физико-технологичен факултети.

Доц. Лекова подкрепи направеното предложение.

След проведеното гласуване, предложението е прието със 7 гласа „за“.

10.03.2020 г.
Пловдив

Протоколчик:
/Милена Славова/

ПРЕДЛОЖЕНИЕ
за Държавни изпитни комисии
за ОКС „бакалавър”

I. Специалност “Химия” - редовно и задочно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 18 септември и 23 октомври 2020 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Пламен Ангелов
Членове:

1. Проф. дхн Васил Делчев
2. Проф. дхн Пламен Пенчев
3. Доц. д-р Петя Маринова
4. Доц. д-р Стоянка Атанасова
5. Доц. д-р Мария Ангелова-Ромова
6. Доц. д-р Георги Патронов

II. Специалност “Медицинска химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 16 септември и 22 октомври 2020 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Веселин Кметов
Членове:

1. Проф. д-р Гинка Антова
2. Проф. д-р Илиян Иванов
3. Доц. д-р Ваня Лекова
4. Доц. д-р Кирил Симитчиев
5. Доц. д-р Стела Статкова-Абегхе
6. Доц. д-р Солея Даньо
7. Доц. д-р Нина Димчева
8. Доц. д-р Георги Патронов

III. Специалност “Компютърна химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 17 септември и 23 октомври 2020 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Проф. д-р Гинка Антова
Членове:

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Виолета Стефанова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
5. Доц. д-р Мария Стоянова
6. Доц. д-р Георги Патронов
7. Доц. д-р Николай Кочев

IV. Специалност “Химия с маркетинг” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 17 септември и 23 октомври 2020 год.
КОМИСИЯ:
Председател: Проф. д-р Гинка Антова
Членове:

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Виолета Стефанова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
5. Доц. д-р Мария Стоянова
6. Доц. д-р Георги Патронов
7. Доц. д-р Теофана Димитрова

V. Специалност "Анализ и контрол" - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 17 септември и 23 октомври 2020 год.
КОМИСИЯ:
Председател: Проф. д-р Гинка Антова
Членове:

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Виолета Стефанова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
5. Доц. д-р Стоянка Атанасова
6. Доц. д-р Солея Даньо
7. Доц. д-р Мария Стоянова
8. Доц. д-р Георги Патронов

VI. Специалност "Химия и физика" и "Биология и химия"- редовно и задочно обучение.

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 28 юли и 18 септември 2020 год.
КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Пламен Ангелов
Членове:

1. Проф. дхн Васил Делчев
2. Проф. дхн Пламен Пенчев
3. Доц. д-р Петя Маринова
4. Доц. д-р Мария Ангелова-Ромова
5. Доц. д-р Георги Патронов
6. Доц. д-р Йорданка Димова

ПРЕДЛОЖЕНИЕ
за Държавни изпитни комисии
за ОКС „магистър”

I. Специалност „Спектрохимичен анализ” – задочно обучение на 16 октомври и 13 ноември 2020 год.

Председател: Доц. д-р Веселин Йорданов Кметов

Членове:
1. Проф. дхн Пламен Николов Пенчев
2. Доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова
3. Доц. д-р Николай Тодоров Кочев

I. Специалност „Медицинска химия” – задочно обучение на 27 юли и 18 септември 2020 год.

Председател: Доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов

Членове:
1. Проф. д-р Илиян Иванов Иванов
2. Доц. д-р Солея Запрянова Даньо
3. Д-р Валентина Борисова Ангелова

II. Специалност „Хранителна химия” – редовно и задочно обучение на 23 октомври и 19 ноември 2020 год.

Председател: Доц. д-р Веселин Йорданов Кметов

Членове:
1. Проф. д-р Гинка Атанасова Антова
2. Проф. д-р Магдален Димитров Златанов
3. Доц. д-р Мария Йорданова Ангелова-Ромова
4. Гл. ас. д-р Жана Юлиянова Петкова

III. Специалност „Обучението по химия в училище“ и „Учител по химия” – редовно обучение на 24 юли и 18 септември 2020 год.

Председател: Проф. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:
1. Доц. д-р Йорданка Димитрова Димова
2. Гл. ас. д-р Йорданка Петрова Стефанова
3. Гл. ас. д-р Антоанета Анастасова Ангелачева
4. Елена Тодорова Божинова-Стефанова – учител по химия (I ПКС)

Предложение

за комисия за провеждане на държавен изпит за допълнителна професионална квалификация „Учител по химия” на 24. 07. 2020 год. и 18. 09. 2020 год., в състав:

Председател: Проф. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:
1. Доц. д-р Йорданка Димитрова Димова
2. Гл. ас. д-р Йорданка Петрова Стефанова
3. Гл. ас. д-р Антоанета Анастасова Ангелачева

До членовете на ФС
на Химическия факултет

ДОКЛАД

от проф. д-р Гинка Антова

Зам. Декан по учебната дейност на Химическия факултет

Уважаеми членове на ФС,

Във връзка с изпълнение на чл. 68 от ЗВО и организацията на приема за ОКС „магистър“ предлагам за учебната 2020/2021 година следния график:

График за провеждане на прием за ОКС „магистър“:

1 октомври – 30 октомври 2020 год. – прием на документи;

3 ноември 2020 год. – провеждане на конкурсен изпит за прием по държавна поръчка;

4 ноември 2020 год – обявяване на класиране;

5 ноември – 11 ноември 2020 год. – записване.

18 май 2020 год.

Зам. Декан на ХФ:

(проф. д-р Г. Антова)

ПРЕДЛОЖЕНИЕ

за семестриални такси за платено обучение по магистърски програми към Химически факултет за учебната 2020/2021 година, както следва:

Наименование	**Форма на обучение**	**Семестриална такса**
Магистърска програма		
Медицинска химия	задочно (2 семестъра)	800 лв.
Медицинска химия *за неспециалисти*	задочно (4 семестъра)	800 лв.
Спектрохимичен анализ	задочно (2 семестъра)	850 лв.
Спектрохимичен анализ *за неспециалисти*	задочно (4 семестъра)	1 година - 800 лв. 2 година - 850 лв.
Химия и екология	задочно (2 семестъра)	800 лв.
Химия и екология *за неспециалисти*	задочно (4 семестъра)	800 лв.
Хранителна химия	задочно (2 семестъра)	800 лв.
Хранителна химия *за неспециалисти*	задочно (4 семестъра)	800 лв.
Компютърна химия	задочно (2 семестъра)	700 лв.
Обучението по химия в училище	редовно (2 семестъра) задочно (2 семестъра)	900 лв. 800 лв.
Обучението по химия в училище *за неспециалисти*	задочно (4 семестъра)	800 лв.

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ
„ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"
ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ
КАТЕДРА ХИМИЧНА ТЕХНОЛОГИЯ

Химически Факултет

КВАЛИФИКАЦИОННА ХАРАКТЕРИСТИКА

ОБЛАСТ НА ВИСШЕ ОБРАЗОВАНИЕ: ***4. Природни науки, математика и информатика***

ПРОФЕСИОНАЛНО НАПРАВЛЕНИЕ: ***4.2. Химически науки***

ОБРАЗОВАТЕЛНО-КВАЛИФИКАЦИОННА СТЕПЕН: **Магистър**

СПЕЦИАЛНОСТ: **Химия и екология – за неспециалисти**

ПРОФЕСИОНАЛНА КВАЛИФИКАЦИЯ: **Химик еколог**

ФОРМА НА ОБУЧЕНИЕ: **Задочна**

СРОК НА ОБУЧЕНИЕ: **2 години (4 семестъра)**

УСЛОВИЯ ЗА КАНДИДАТСТВАНЕ:

Дипломирани бакалаври в областта на природните науки, математика и информатика, техническите науки, медицинските науки, селскостопанските науки и др., в които обучението по химически науки не е включено в учебните планове или е в недостатъчен обем.

ФОРМА НА ДИПЛОМИРАНЕ: **Държавен изпит или защита на дипломна работа**

КРЕДИТИ: **135**

Съдържание на магистърската програма

Магистърска програма „Химия и екология" предвижда обучение през първата година по основните химически дисциплини – неорганична химия, органична химия, аналитична химия, физикохимия, химия и опазване на околната среда. Тази базова подготовка е необходима за усвояването на надграждащото специализирано обучение по екология и опазване на околната среда през втората година, а именно: основните направления на общата екология, инженерната екология, радиоекологията, химичния анализ на екологични обекти, възобновимите енергийни източници. Застъпени са също така важни дялове от биоиндикацията, защитените природни обекти, екологичното право, химия и анализ на хранителните продукти. С това се постига много добра теоретична и практическа надстройка над бакалавърската степен за студенти, които проявяват интерес към работата в научно-изследователски и екологични лаборатории, в отделите по екология към общини и фирми, РИОСВ, Басейнови дирекции, в различните пречиствателни станции към заводи и общини и др. Завършилите придобиват

съвременни теоретични и приложни умения, полезни за тяхната реализация като млади специалисти.

Досегашният опит показва, че голямо предимство на магистратурата „Химия и екология" е успешната реализация на завършилите студенти. Те също така могат да продължат обучението си за получаване на образователно-научната степен "Доктор" в Университета, както и в други висши училища в България или в чужбина.

Основна цел на програмата

Учебните дисциплини в магистърската програма „Химия и екология" имат за задача да дадат знания за основните закономерности на химията и екологията и да покажат влиянието на съвременния начин на живот и производство върху природната среда. Акцентира се силно на влиянието на промишлеността, енергетиката и химизацията върху биосферата. Получените знания в магистърската програма допринасят за формирането на добре подготвени и информирани специалисти с цел успешната им реализация на пазара на труда.

Основни направления на знанията и уменията

- Получаване на фундаментални и научно-приложни знания в областта на екологията, опазването на околната среда, пречистването на газови емисии и отпадъчни води, химичния анализ на екологични обекти, радиоекологията, възобновимите енергийни източници, безотпадните химични технологии;
- Придобиване на съответни умения за реализиране на професионална дейност като работа с аналитична апаратура, моделиране на обекти от околната среда чрез анализ на мониторингови данни, оценка на риска от замърсяване;
- Систематизиране на знанията и информацията за химизма на явленията в природния и антропогенния свят, базиращи се на екологията;
- Възможност за успешна реализация като специалисти в екологични лаборатории на Изпълнителната агенция по околна среда, пречиствателни станции, заводи от химическата и металургичната промишленост, администрацията на общини и предприятия във връзка с наблюдението, контрола и опазването на околната среда.

Компетентности

- Задълбочени познания върху важни принципи, теории, понятия и факти в химията и екологията;
- Способност за прилагане на получените знания за решаване на конкретни задачи от опазването на околната среда;
- Способност за оценка, интерпретация и обобщаване на химични и екологични данни и информация;
- Умения за решаване на изчислителни задачи и моделиране на екологични явления с използване на специализирани софтуерни продукти;

- Практически умения за провеждане на химичен експеримент и анализ на екологични обекти, и работа в химична лаборатория;
- Способност за мониторинг и документиране на различни химични и екологични процеси;
- Способност за извличане и интерпретация на информация чрез наблюдение и контрол на различни екологични обекти;
- Познания за процесите, апаратите и технологиите за очистване на газови и течни системи и прилагането им в практиката;
- Теоретични знания и практически умения за работа в пречиствателни станции, отдели, дирекции по екология и опазване на околната среда

Сфери на реализация

Обучаващите се по програма за образователно-квалификационна степен „Магистър по химия и екология" се подготвят за следните дейности:

- разработване на нови и усъвършенстване на съществуващи апарати, процеси и технологии за опазване на околната среда от газови, течни и аерозолни замърсители в химическата и металургична промишленост, енергетиката, селското стопанство, хранително-вкусовата промишленост и др.
- работа в лаборатории с химическа и екологична насоченост чрез използването, разработването и внедряването на нови методи за анализ на екологични обекти;
- работа в екологични лаборатории на Изпълнителната агенция по околна среда, Басейнови дирекции, фирми/отдели/звена и общини в областта на екологията и опазването на околната среда;
- научно-приложни изследвания в сферата на химията и екологията и граничните на тях области, както и по проблеми, свързани с производството на химични продукти при спазване на националните и европейските норми за опазване на околната среда.

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

Д О К Л А Д

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 квалификационна характеристика на докторска програма по Неорганична химия,
област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика
професионално направление 4.2. Химически науки.

Приложение:
1. Препис от протокол №186/10.03.2020 г.
2. Квалификационна характеристика на докторска програма по Неорганична химия

10.03.2020 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 10.03.2020 г.

Протокол № 186

На 10.03.2020 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 8.

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 и гл. ас. д-р Павел Янев

Отсъства 1: гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 4. Квалификационна характеристика на докторска програма по „Неорганична химия“

Доц. Лекова прочете предложението за квалификационна характеристика на докторска програма по „Неорганична химия“.

След проведеното гласуване, предложението е прието със 7 гласа „за“.

10.03.2020 г.
Пловдив

Протоколчик:
/Милена Славова/

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

КВАЛИФИКАЦИОННА ХАРАКТЕРИСТИКА

на докторска програма „Неорганична химия"

област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика

професионално направлиние: 4.2. Химически науки

Форма на обучение	редовна, задочна, самостоятелна
Продължителност на обучението	3 г. – редовна, самостоятелна 4 г. – задочна
Форма на завършване	успешна защита на дисертационен труд
Придобита професионална квалификация	доктор
Катедра	Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия
Факултет	Химически факултет

Пловдив

2020 г.

Докторската програма по „Неорганична химия“ формира знания, умения и компетентности в областта на съвременната неорганична химия и предоставя качествена теоретическа и практическа подготовка за самостоятелна научноизследователска, научноприложна и преподавателска работа в академични институции, научноизследователски институти, в промишлеността и бизнеса. Програмата подготвя висококвалифицирани и мотивирани личности, конкурентноспособни на пазара на труда.

Специалистите, след присъдената им от Научно жури образователна и научна степен „Доктор“ по професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Неорганична химия“, притежават знания, умения и компетентности съобразно изискванията на Националната квалификационна рамка на Република България за най-високото равнище на образование (8 – доктор):

Знания

- знания по неорганична химия с висока степен на сложност и знания за нейните методи на изследване;
- знания в специализирани области от неорганичната химия за извършване на оценка, критичен анализ и генериране на нови идеи;
- знания в гранични научни области, необходими за осъществяване на продуктивни научни изследвания;
- демонстрира и изразява знания чрез степента на сложност на проведените, разбрани и обосновани научни изследвания.

Умения

- умения за търсене, намиране, анализиране, синтезиране и интерпретиране на необходимата информация по научен проблем от различни източници;
- умения за генериране на нови идеи за усъвършенстване или иновиране на модели, подходи, методи и техники за научно изследване;
- умения за решаване и преодоляване на възникнали проблеми в научно-изследователската работа;
- умения за представяне на резултати от изследователска работа в научни статии и в доклади пред национални и международни научни форуми;
- умения за позитивна комуникация и отговорна работа в група и в екип.

Компетентности

Самостоятелност и отговорност

- способност за критичен самоонализ и самооценка на постиженията в научно-изследователската работа;
- способност за самостоятелно съставяне, проектиране, изпълнение и аиадаптиране на изследователски процес по определена научна тема/проблем;
- компетентности за самостоятелна научноизследователска, научноприложна и преподавателска работа в академични институции, научноизследователски институти, в промишлеността и бизнеса;
- стремеж към непрекъснато повишаване на знанията по неорганична химия, както и към изява на знанията и уменията на високо равнище.

Компетентности за учене

- умения да се осъзнават целите и резултатите от собствените действия и дейности, да се формулират цели, самостоятелно да се преценяват необходимите материални ресурси и личностни качества при планиране, проектиране и извършване на определена работа, да се избират методи и средства, адекватни на зададените цели и задачи за научно познание, за постигане на добър познавателен резултат;
- капацитет за систематично придобиване и разбиране на значително количество знания от най-съвременните научни постижения по неорганична химия или от областта на професионалната практика.

Комуникативни и социални компетентности

- умения, изискващи проявяване на висока лична отговорност, самостоятелна инициативност в сложни и непредвидими обстоятелства, както и в професионална или еквивалентна среда;
- умения за пълноценно общуване на някои от най-разпространените европейски езици.

Професионални компетентности

- извършване на информирани преценки по сложни въпроси в областта на неорганичната химия и в други, близки до нея научни области, дори в отсъствието на пълни данни;
- ясно представяне на идеи и заключения пред специалисти и неспециалисти.

Професионален профил на завършилите

Докторантите, обучавани по докторската програма „Неорганична химия“, след защитата на дисертационния труд, придобиват образователната и научна степен „Доктор“ и прилагат знания, умения и професионални компетентности в областта на неорганичната химия като преподаватели в академични звена на университети и в научноизследователски звена на институции, фирми и бизнеса.

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 под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 12.05.2020 г., беше разгледан Доклад-самооценка, изготвен за периода 2015 - 2020 г. във връзка с програмната акредитация на ОНС доктор – докторска програма „Теоретична химия“. Докладът-самооценка беше приет с 12 гласа „за“.

Моля Докладът-самооценка да бъде утвърден на ФС на ХФ.

Прилагам препис-извлечение от протокола на катедрения съвет;

12.05.2020 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”,
от 12.05.2020г.

ПРОТОКОЛ № 6

На 12.05.2020 г. се състоя заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 13

В конферентната връзка участваха: 12

Не участвала гл. ас. д-р Е. Върбанова – в майчинство.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1. от дневния ред беше разгледан Доклад-самооценка, изготвен за периода 2015 – 2020 г. във връзка с програмната акредитация на ОНС доктор – докторска програма „Теоретична химия“. Докладът-самооценка беше приет с 12 гласа „за“.

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да утвърди представеното по-горе решение на КС на КАХКХ.

12.05.2020 Протоколчик:

/гл. ас. д-р С. Цонева/

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

Д О К Л А Д

от доц. д-р Нина Димчева
ръководител катедра Физикохимия

Уважаеми г-н Декан,

Във връзка с предстоящата акредитация на докторска програма „Теоретична химия", докладът-самооценка за периода 2015-2020 год. беше разгледан и приет единодушно на он-лайн заседание на КС на кат. Физикохимия, състояло се на 13.05.2020 год. Докладът-самооценка е разгледан и приет на КС на КАХКХ от 12.05.2020 г.

Моля да внесете доклада-самооценка за програмната акредитация на ДП „Теоретична химия" във Факултетния съвет за утвърждаване.

Към настоящия доклад прилагам препис-извлечение от протокола на катедреното заседание.

14. 05. 2020 г. Р-л. катедра:
Пловдив /доц. д-р Н. Димчева/

Препис – извлечение
от онлайн заседание
на кат. Физикохимия

П Р О Т О К О Л № 5

Днес, 13.05.2020 г. се проведе онлайн заседание на Катедрения съвет на катедра Физикохимия.

Присъстват: доц. д-р Н. Димчева, проф. дхн В. Делчев, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Д. Петров, ас. П. Певичаров, ас. Хр. Кръстева, ас. М. Пимпилова, хим. В. Колчева, хим. М. Георгиева, хим. Н. Делчева.

Онлайн заседанието протече по следния дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Разни

По т.1.1. доц. д-р Н. Димчева представи за разглеждане на КС Доклад – самооценка на Докторска програма по Теоретична химия за периода от 2015 до 2020 год..

Всички членове на КС приеха доклада –самооценка на ДП по Теоретична химия и гласуваха единодушно със 7 - „ за“. Въздържали се – няма. Против – няма.

По т.1.2.....

По т.1.3….....

13.05.2020 г.

Протоколчик:
(М. Георгиева)

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

Д О К Л А Д

от доц. д-р Нина Димчева
ръководител катедра Физикохимия

Уважаеми г-н Декан,

Във връзка с предстоящата акредитация на докторска програма „Физикохимия", докладът-самооценка за периода 2015-2020 год. и приложенията към него, подготвени от комисия в състав: доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Н.Димчева и доц. д-р Д. Петров, бяха разгледани и приети единодушно на он-лайн заседание на КС на кат. Физикохимия, състояло се на 13.05.2020 год.

Моля да внесете във Факултетния съвет за утвърждаване на доклада-самооценка за програмната акредитация на ДП „Физикохимия".

Към настоящия доклад прилагам препис-извлечение от протокола на катедреното заседание.

14. 05. 2020 г. Р-л. катедра:
Пловдив /доц. д-р Н. Димчева/

Препис – извлечение
от онлайн заседание
на кат. Физикохимия

П Р О Т О К О Л № 5

Днес, 13.05.2020 г. се проведе онлайн заседание на Катедрения съвет на катедра Физикохимия.

Присъстват: доц. д-р Н. Димчева, проф. дхн В. Делчев, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Д. Петров, ас. П. Певичаров, ас. Хр. Кръстева, ас. М. Пимпилова, хим. В. Колчева, хим. М. Георгиева, хим. Н. Делчева.

Онлайн заседанието протече по следния дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Разни

По т.1.1.....

По т.1.2. доц. д-р Н. Димчева представи за разглеждане на КС Доклад – самооценка на Докторска програма по Физикохимия за периода 2015-2020 год..

Всички членове одобриха доклада-самооценка на ДП по Физикохимия и гласуваха единодушно със 7 – „ за“. Въздържали се – няма. Против – няма.

По т.1.3….....

13.05.2020 г.

Протоколчик:
(М. Георгиева)

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

Д О К Л А Д

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

Господин Декан,

Моля да внесете за утвърждаване от Факултетния съвет следните **Доклади – самооценка** на:

- Докторска програма „*Технология на неорганичните вещества*“ и
- Докторска програма „*Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати*“,

във връзка с програмната акредитация на професионално направление 4.2. Химически науки.

Прилагам препис от протокола на катедрения съвет.

14.05.2020 г. Ръководител кат. ХТ:

(доц. д-р М. Ангелова-Ромова)

Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"
Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 133

от катедрено съвещание

Препис

Днес 14.05.2020 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 О. Тенева и гл. ас. д-р И. Костова.

Отсъстваха: доц. д-р Д. Тончев – в неплатен отпуск.

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Учебни въпроси

Членовете на катедрения съвет обсъдиха следните Доклади-самооценка на:

- Докторска програма „*Технология на неорганичните вещества*“ и
- Докторска програма „*Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати*“,

във връзка с програмната акредитация на професионално направление 4.2. Химически науки.

След обсъждане, бе решено да се предложи на Факултетния съвет да утвърди предложените Доклади – самооценка.

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 “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 02.04.2020 г., бе разгледан ***отчетът на редовен докторант Лидия Иванова Кайнарова за втората година от докторантурата ѝ***. В заседанието участваха двамата научни ръководители на докторанта – доц. д-р Виолета Стефанова и гл. ас. д-р Деяна Георгиева. Доц. д-р Виолета Стефанова запозна членовете на катедрата със становището на научните ръководители и предложи оценка Отличен (6) за втората година на докторантурата. След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научните ръководители бяха единодушно приети с 10 гласа „за“.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчетът на Лидия Иванова Кайнарова с оценка Отличен (6).

Прилагам:

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

02.04.2020 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”,
от 02.04.2020

ПРОТОКОЛ № 3

На 02.04.2020 г. се състоя заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 13

В конферентната връзка участваха: 10

Не участваха гл. ас. д-р Е. Върбанова, гл. ас д-р О. Пукалов и проф. д.н. П. Пенчев по уважителни причини

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Лидия Иванова Кайнарова за втората година от редовната ѝ докторантура. На заседанието участваха двамата научни ръководители на докторанта – доц. д-р Виолета Стефанова и гл. ас. д-р Деяна Георгиева. Доц. д-р Виолета Стефанова запозна членовете на катедрата със становището на научните ръководители. След дискусия, отчетът беше приет с 10 гласа “за” и беше дадена оценка Отличен (6) за извършените дейности от докторанта.

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Лидия Иванова Кайнарова за втората година от редовната ѝ докторантура с оценка Отличен (6).

02.04.2020 Протоколчик:

/гл. ас. д-р С. Цонева/

	ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ" **ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ**	

С Т А Н О В И Щ Е

за изпълнението на индивидуалния учебен план за втората година от докторантурата на ***Лидия Иванова Кайнарова*** **-** редовен докторант, към катедра Аналитична химия и компютърна химия, ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ, ПУ "Паисий Хилендарски"

Област на висше образование: **Природни науки, математика и информатика**

професионално направление: **4.2 Химически науки**

докторска програма: **Аналитична химия**

Тема на дисертационния труд: **"Изследване на аналитичните възможности на масспектрометрията с индуктивно свързана плазма за идентификация, охарактеризиране и определяне на наночастици"**

от

доцент доц. д-р. Виолета Миленкова Стефанова и

гл. ас. д-р Деяна Любомирова Георгиева

научни ръководители на докторанта

Лидия Кайнарова е зачислена като редовен докторант в докторска програма Аналитична химия от 1.03.2018 година със заповед на Ректора № Р33-863 от 23.02.2018 г. с тема на дисертационния труд: „Изследване на аналитичните възможности на масспектрометрията с индуктивно свързана плазма за идентификация, охарактеризиране и определяне на наночастици“.

Въпреки необичайните условия на работа през настоящия отчетен период, предизвикани от ремонта на сградата на ХФ и насложилата се ситуация с извънредното положение обявено в страната заради COVID 19, докторант Кайнарова успя да изпълни всички дейности предвидени в индивидуалния ѝ учебен план за втората година.

Експерименталната работа по темата на дисертация бе насочена към продължаване на изследванията свързани с охарактеризиране на сребърни наноколоиди чрез SP-ICP-MS. Проучванията за приложение на метода за охарактеризиране на наноразмерни материали са разширени с включване на наноматериали от TiO_2.

Направено е систематично проучване относно влиянието на инструменталните параметри на измерването върху отношението сигнал - шум при анализ на сребро (m/z 107) и са откроени тези от тях, които оказват най-съществено влияние.

Продължени са търсенията на подходящи статистически критерии за разделяне на фонов сигнал, от този, генериран от наночастиците при off-line обработка на сурови сигнали. Предложени са два подхода за определяне на граничния сигнал в зависимост от времето за единично измерване (dwell time).

За охарактеризиране на размера на наночастици от сребро са тествани и сравнени резултатите при два подхода за установяване на връзката регистриран сигнал/диаметър на наночастицата (при допускане на сферична форма):

- калибрация чрез измерване на набор от йонни стандарти, установяване на функционалната зависимост между сигналите и маса на сребро, регистрирана за фиксирано време на единично измерване и последващо изчисление на диаметър на частиците
- директна калибрация с три референтни материала със сертифицирани размери.

Установено бе, че чрез двете калибрационни стратегии се получават съпоставими резултати за наночастици с размери в диапазона 20 ÷ 100 nm.

За първи път е предложено неопределеността на сигнала при измерване на йонни стандарти, да се използва за да се оцени неопределеност на изчисляваните диаметри на частиците. Това позволява коректното определяне на разделителната способност на SP-ICP-MS метода при анализ на наноматериали с различни размери.

Калибрацията чрез йонни стандарти е приложена и при определяне размера на наночастици от TiO_2. Сравнени са получените резултати за размер на наноматериали от TiO_2, със съответната им интервална оценка, при използване на два теоретични модела за изчисляване – на сферична и кубична форма.

Резултатите от проведените изследвания са представени на четири научни форума:

- два доклада представени на 10-та юбилейна национална конференция по химия (пленарен доклад) и Пета научна конференция за студенти, докторанти и млади учени
- две постерни участия – едното на международен форум (9-th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries) и другото на научен семинар съвместно организиран от ХФ на ПУ и фирма ACM2

В процес на подготовка е публикация, която ще бъде предложена за публикуване в реферирано и индексирано списание.

На 21.02.2020 г. докторант Кайнарова се яви и на заложения в индивидуалния план за втората година изпит по специалността, който взе с **отличен** успех.

Наред с постоянния ангажимент по развиване на тематиката на дисертацията като асистент в КАХКХ, за отчетния период Лидия Кайнарова има отчетена учебна натовареност от 375 часа упражнения в дисциплините „Аналитична химия с инструментални методи за анализ“ и „Клинични анализи“ за студенти от бакалавърски специалности на Химическия и Биологическия факултети. Тя се включва активно и в работата касаеща подготовка на учебни материали за дистанционно обучение по тези специалности

Въпреки породените от външни фактори затруднения, през изминалата година докторант Кайнарова работи упорито и концентрирано, като продължи да натрупва аналитичен, инструментален и педагогически опит. В своята работа тя е прецизна и отговорна и изпълнява дейностите свързани с нейния дисертационен труд.

Всичко гореизложено ни дава основание да предложим да ѝ бъде дадена отлична оценка за работата през втората година.

02.04.2020 Научни ръководители:

доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова

гл. ас. д-р Деяна Любомирова Георгиева

ПОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"
ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

от ***Лидия Иванова Кайнарова*** - редовен докторант при Химически факултет, катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

за периода: 03.2019-03.2020г.

По тема на дисертационната работа:

"Изследване на аналитичните възможности на масспектрометрия с индуктивно свързана плазма за идентификация, охарактеризиране и определяне на наночастици"

I. Обучение и научни форуми

1. Обучение - през изминалата година успешно положих изпит по специалността.
2. Научни форуми – резултатите са представени на следните 4 научни форума:

- **9-th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries** - постерно участие на тема: *„spICP-MS – critical evaluation of some parameters affecting quantification of silver nanoparticles",* Targoviste, Romania
- **ACM2** – постерно участие на тема: *„Сравнение/оценка на разпределението по размери на сребърни наночастици чрез два калибрационни подхода",* гр. Пловдив
- **10-та юбилейна национална конференция по химия –** пленарен доклад на тема *"Characterization of TiO_2 nanoparticles by spICP-MS and ionic standards calibration strategy",* гр. София
- **Пета научна конференция за студенти, докторанти и млади учени** – доклад на тема: *„Тестване и валидиране на калибрационни стратегии при определяне на концентрация и размери на наночастици със spICP-MS"*гр. Пловдив

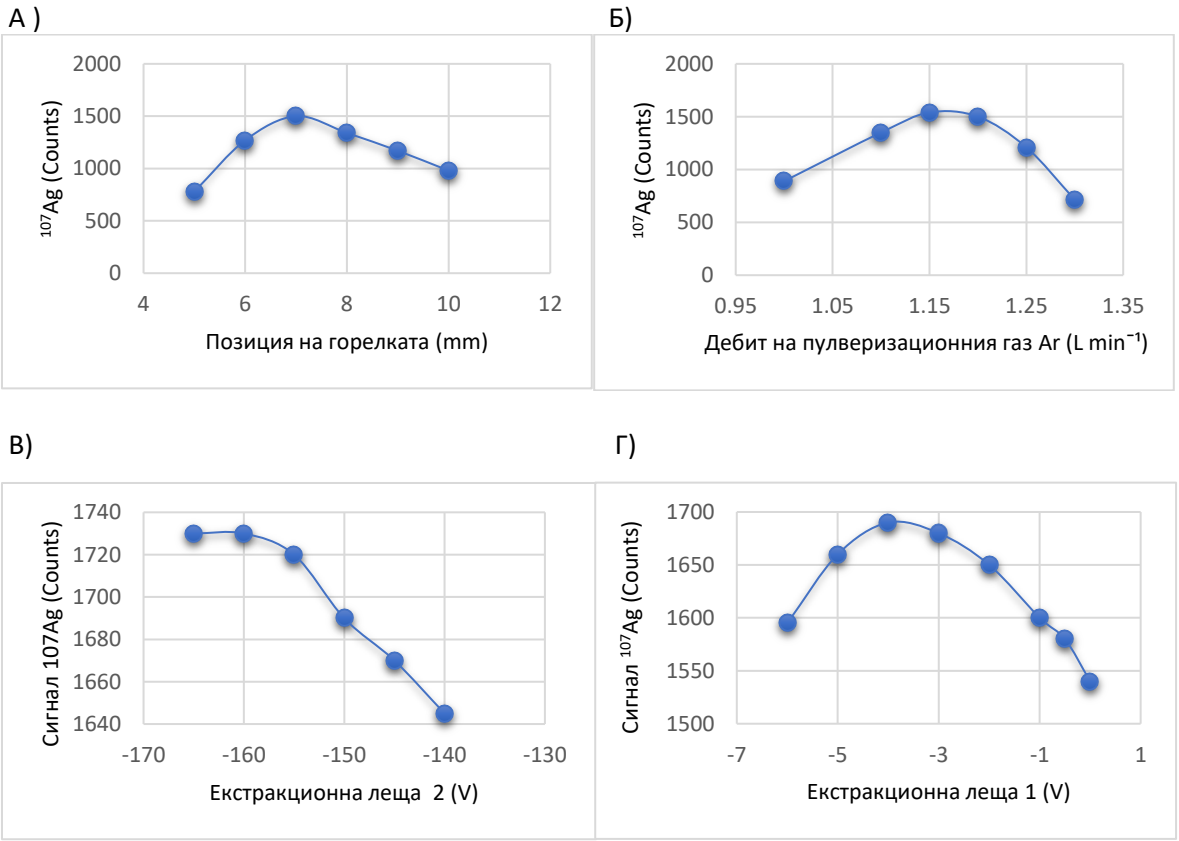
II. Работа по дисертацията

Експерименталната работа по темата на дисертацията през втората година бе фокусирана върху тестване и валидиране на два калибрационни подхода – калибрация по три референтни материала и калибрация по йонни стандарти, целящи по-добро охарактеризиране на размерите и разпределението по размери на AgНЧ в колоидни суспензии. Изследванията включват съпоставка на получените резултати по двата калибрационни подхода, както и оценка на приложимостта на калибрацията по йонни стандарти при охарактеризиране размерите на наночастици, за който не са налични монодисперсни СРМ. Направена е предварителна оптимизация на някои инструментални параметри, целящи постигането на по-добра чувствителност и стабилизиране на сигнала в процеса на анализ, която е от ключово значение за

разделяне на сигналите, генерирани от сребърни йони и тези, генерирани от наночастици.

1. Оптимизиране на инструменталните параметри

За разлика от стандартния режим на работа на ICP-MS, при който оптимизацията на инструменталните параметри е насочена към постигане на компромисна чувствителност за елементите в целият масов диапазон, в режима на детекция на единични наночастици най-често се мониторира изотоп на един елемент, което предполага различен подход на оптимизация. Насочената оптимизация на инструменталните параметри позволява работа при максимална чувствителност и стабилност за сигналите на измервания елемент, което е критично за доброто разделяне на сигналите на наночастиците от постоянния сигнал и оказва влияние както върху частичковата концентрация, така и върху границата на откриване по отношение на размери при spICP-MS анализа. За оптимизация на инструменталните параметрите при анализ на сребърни наночастици е използван йонен стандарт на сребро с концентрация 1 µg L^{-1}. Изследвано е влиянието върху нивото и относителното стандартно отклонение на сигнала за ^{107}Ag на следните параметри: позицията на горелката, дебита на пулверизиращият газ и потенциалите на есктрахиращите лещи на йонната оптика. Резултатите са представени на фигура 1.



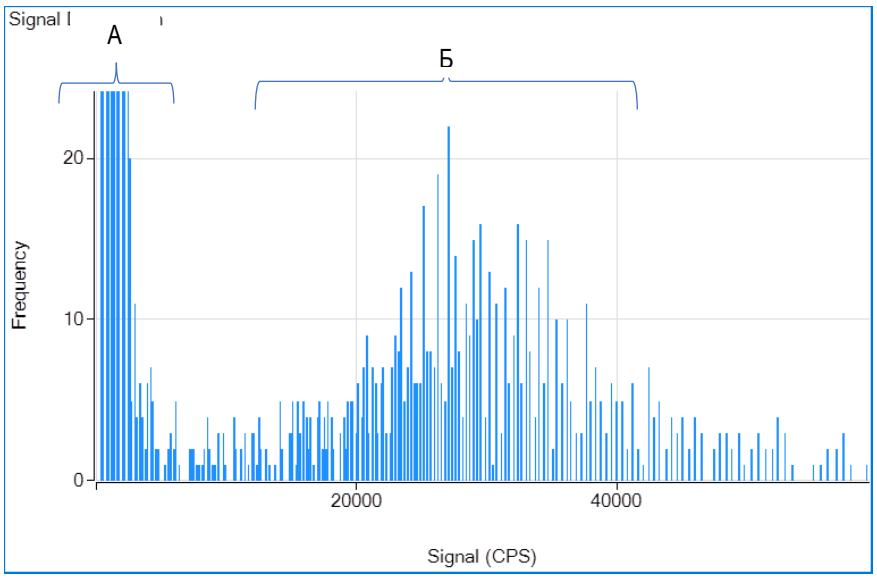
Фигура 1. *Влияние на позиция на горелката (А), дебит на пулверизиращия газ (Б), и потенциали на екстракционните лещи 1 (Г) и 2 (Д) върху сигнала регистриран за ^{107}Ag в йонен стандарт с концентрация 1 µg L^{-1} и време за интегриране 10 ms.*

От проведеното изследване се вижда, че най-съществено влияние върху чувствителността оказват позицията на горелката и дебита на пулверизиращия газов поток, при варирането на които може да се постигне до двукратно увеличаване на сигнала. По слабо изразено е влиянието на екстракционните лещи, където вариацията на сигнала е между 5 и 10%.

Всички следващи експерименти са проведени при оптималните стойности за изследваните параметри - позиция на горелката 7 mm; дебит на пулверизиращия газ 1.15 L min^{-1}, потенциали на екстракционните лещи съответно -4 V и -160 V.

2. Определяне на граничен диаметър

Едно от основните предимства на spICP-MS метода е способността за едновременно наблюдение на сигнали генерирани от НЧ и сигнали генерирани от йони на анализирания елемент, които присъстват в суспензията. В резултат на това се генерират два домейна – на сигналите принадлежащи на йоните и този принадлежащ на НЧ – фиг.2 А) и Б).



***Фигура 1**. Статистическа оценка за честотата на поява на сигнали, генерирани от йонна форма и наночастици, в рамките на едно измерване на разреден разтвор на RM (AgNPs 40 nm, 20 ng L^{-1}*

За да бъдат адекватно охарактеризирани както размерите на НЧ, така и аналитичните характеристики на метода (LOD, BED) е необходимо двата домейна от сигнали да бъдат коректно разграничени един от друг. Това може да бъде постигнато чрез определяне на т.нар. гранично ниво (граничен сигнал), над което генерираните сигнали се преписват на НЧ. Граничният сигнал представлява минимума в честотите на поява между домейните, като всички по-високи сигнали се преписват на домейна на НЧ.

За да осигурим адекватно определяне на граничния сигнал изследвахме два статистически подхода. Първият подход е предложен от Pace et al. [1] и се основа на допускането, че фоновият сигнал е нормално разпределена величина. В този случай за отделяне на сигналите на наночастиците се прилага статистическия 3σ критерий, който позволява да се оцени присъствието на бегълците в съвкупността на нормално разпределените постоянни сигнали. Разделянето на двата домейна е основано на

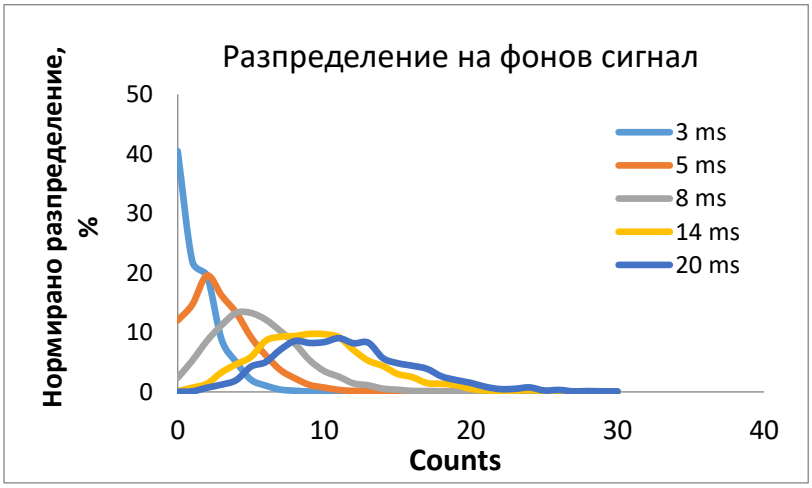
статистическа обработка на всички измерени сигнали, определяне на средна стойност и стандартното отклонение (SD), след което от данните се изваждат бегълците (т.е. сигнали, чиято стойност надвишава сумата x̄ + 3×SD). Операцията се повтаря с останалата извадка, докато останат само сигнали, принадлежащи на йонния домейн (т.е. няма стойности извън интервала x̄ + 3×SD). Извадката, останала след статистическата обработка се приписва на постоянния сигнал, а отделените сигнал се причисляват към домейна на наночастиците. За да се предотврати попадането на фалшиво положителни сигнали генерирани от йоните към домейна на наночастиците граничното (threshold) ниво се изчислява с 5σ (x̄ + 5×SD). Този сигнал се трансформира в маса, а масата съответно в диаметър. Метод е много подходящ, когато домейна на непрекъснатия сигнал има нормално разпределение. Именно този диаметър определя и границата на откриване на spICP-MS метода по отношение на размера на охарактеризираните наночастици.

Вторият подход е предложен от Laborda et al. и намира приложение, когато сигналът на фона не е нормално разпределена величина. В този случай границата на откриване по отношение на размери може да бъде изчислена съгласно Поасоновата статистика по уравнение 1 [2]:

Уравнение 1: $LOD = \mu_B + k\sqrt{\mu_B + 1}$,

където при k=3 се гарантира с 99% статистическа сигурност, че генерираните сигнали над този, принадлежат на наночастици, а μ_B е средна стойност на фоновия сигнал.

Тъй като граничният сигнал силно зависи от нивото и стабилността на фона, за да изберем подходящ алгоритъм за определянето му изследвахме поведението на фоновия сигнал при различни времена за интегриране (в интервала от 3 до 20 ms). За целта измерихме нивата на фоновия сигнал в празна проба. Разпределението на сигналите при различните времена за интегриране е представен на фиг. 3.



Фигура 3. *Влияние на времето за интегриране върху плътността на разпределение (нормирана в %) на фонови сигнали за Ag*

От получените резултати става ясно, че при по-кратките времена за интегриране от порядъка на 3 до 5 ms фоновият сигнал не е нормално разпределена величина и в този случай статистическият подход базиран на x + 3σ може да доведе до неадекватни

резултати при определяне на граничния сигнал. С нарастване на времето за интегриране – над 8 ms нараства и времето за акумулиране на сигнала генериран от фона, което води до повишаване както на нивото на сигнала, така и на неговата стабилност. Въз основа на получените резултати изчислихме границата на откриване по съответните статистически подходи: при време за интегриране над 8 ms за определяне границата на откриване е използван x + 3σ, докато при 3 и 5 ms за изчисление границата на откриване е приложена Поасонова статистика. Резултатите са представени в таблица 1 и включват данни за средната стойност и стандартното отклонение на по 3 паралелни реплики за всяко време за интегриране и съответните граници на откриване, които могат да бъдат използвани при статистическо разделяне на фоновия сигнал от съответните НЧ.

Background *(counts)*	Време за интегриране				
	3 ms	**5 ms**	**8 ms**	**14 ms**	**20 ms**
Average	1.3	3.2	5.4	9	11
SD	1.2*	1. 8*	3	4	4
Threshold (k=3)	**6****	**9****	**14**	**22**	**24**
(k=6)	**12****	**18****	**23**	**35**	**36**

$* \sigma^2 = \mu_b$

$** Sc = \mu_b + k\sqrt{\mu_b + 1}$

Таблица 1. *Влияние на времето за интегриране върху статистическите оценки на фоновия сигнал - средна стойност, стандартно отклонение и съответните граници на откриване.*

3. Определяне на размерите на наночастиците и охарактеризиране на разпределението по размери на наночастици от Ag със SP-ICP-MS използвайки различни калибрационни подходи

3.1 Калибриране по сертифициран референтен материал

За охарактеризиране размерите на НЧ в колоидни разтвори, специализираният софтуер на spICP-MS използва едноточкова калибрация по сертифициран референтен материал, която описва връзката между генерираните сигнали от наночастиците и техните диаметри. За целта сертифицираният референтен материал, трябва да бъде с добре охарактеризирани размери и да има същия елементен състав и плътност, като тези на наночастиците в анализираната пробата. Ако това условие е изпълнено, то от уравнение 2, даващо зависимостта маса – диаметър за сферични наночастици може да бъде изчислена средната маса, която съответства на изчисления среден диаметър.

Уравнение 2: $m_{Std} = \frac{4}{3} \times \pi \left(\frac{d_{Std}}{2\times10^7}\right)^3 \times \rho_{Std} \times 10^5,$

където m_{Std} е масата на една НЧ в СРМ (fg), d_{Std} е диаметъра на референтната частица (nm), а ρ_{Std} е плътността на една НЧ в СРМ (g cm^{-3})

При известна маса на една НЧ в СРМ от уравнение 3 може да бъде изчислена масата на една наночастица в неизвестната проба:

Уравнение 3: $m_{n_p} = \frac{Irm}{Irm_n} \times m_{STD},$

където m_{np} е масата на определяемата частица (fg), I_{rm} сигналът генериран от една НЧ от РМ (cps) I_{rm_n} сума от сигналите генерирани от НЧ в РМ (cps), m_{std} – маса на една наночастица в СРМ (fg).

За определяне на масата на наночастицата в неизвестната проба освен РМ са необходими и 1 йонен стандарт, който се използва за оценка на чувствителността и данни за транспортната ефективност, чрез които се оценява загубата на сигнал от йонния стандарт, породена от непълния пренос на капчиците аерозол през пулверизационната камера.

От кубичната зависимост маса/диаметър (уравнение 4) може да бъде изчислен диаметъра на анализираните наночастици в неизвестната проба:

Уравнение 4: $$d_p = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} \times \frac{m_{p_n}}{\rho_p}}$$

m_{p_n} е масата на една НЧ в неизвестната проба (fg), d_p е диаметъра на наночасттицата в неизвстната проба (nm), а ρ_p е плътността на една НЧ в неизвестната проба (g cm^{-3})

3.2 Калибрация по сертифицирани референтни материали

Калибрацията по няколко референтни материала позволява да се направи по-прецизно и надеждно охарактеризиране на изследваните наночастици, спрямо едноточковата калибрация по РМ. При този подход като калибранти се използват монодисперсни референтни материали на наночастици със сертифицирана стойност на диаметъра. Ако геометрията и плътността на наночастиците в калибранта и пробата съвпадат, то директно се извежда зависимостта регистриран сигнал/диаметър на наночастицата. За целите на нашето изследване сме използвали три СРМ на Ag наночастици със сертифициран размери: 40 ± 4 nm, 60 ± 8 nm и 100 ± 8 nm. Работните концентрации и условията в етапа на пробоподготовка са посочени в таблица 2.

	Ag NPs 40 nm	**Ag NPs 60 nm**	**Ag NPs 100 nm**
Работна концентрация на пробите, ng.L^{-1}	20	80	600
Фактор на разреждане	1.07×10^{6}	2.5×10^{5}	3.3×10^{4}
Метод за хомогенизиране	УЗ вана	УЗ вана	УЗ вана
Време за хомогенизиране, min	10	10	10
Носещ разтворител	BDW	BDW	BDW
Миещ разтворител	5% р-р HNO_3	5% р-р HNO_3	5% р-р HNO_3

***Таблица 2**. Пробоподготовка на използваните СРМ*

При обработка на генерираните сигнали най – напред беше изчислен граничният сигнал, чрез прилагане на x ± 5σ с цел коректно разделяне на сигналите на НЧ от тези на фона. Тъй като референтните материали, с които разполагаме не са строго монодисперсни за извеждане на функционалната зависимост сигнал/диаметър на Ag НЧ използвахме два подхода за всеки от референтните материали. В първият подход определихме най-често появяващият се сигнал в извадката, който се приписва на съответния среден диаметър (фиг. 4А), а във вторият случай средната стойност на сигналите в интервала съответстващ на средния диаметър (фиг. 4Б)

Данните са обобщени в таблица 3, като са представени резултатите за сигналите на 3 паралелни реплики за всеки РМ при време за интегриране 5ms, както следва: А) най-често появяващ се сигнал и Б) средната стойност на сигналите.

А)

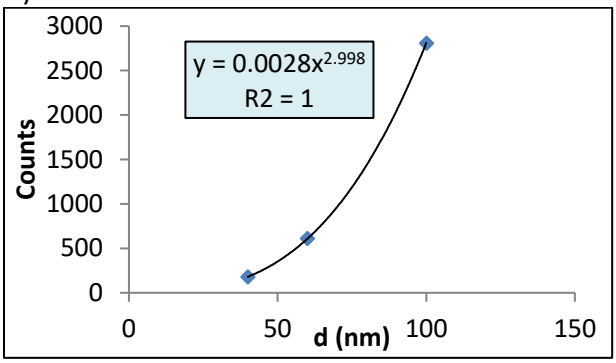
Mode Counts of NPs	d, nm
176	40
629	60
2798	100

Б)

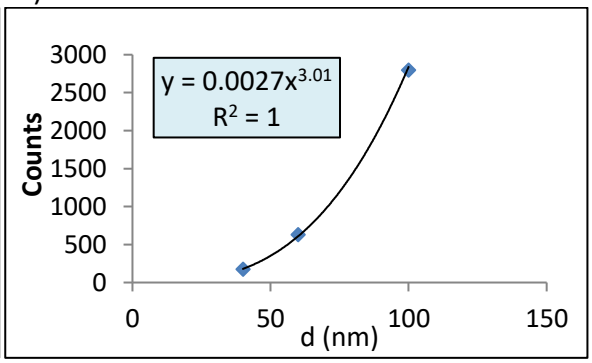
Average Counts of NPs	d, nm
180	40
609	60
2808	100

***Таблица 3**. Сигнали генерирани от 3 СРМ*

А)



Б)



***Фигура 4** . 2Зависимост на регистрирания сигнал от диаметъра на Ag НЧ*

Параметрите на двете калибрационни зависимости показват, че и двата подхода за обработка на сигналите дават съпоставими резултати.

3.3. Калибрация по йонни стандарти

Един от сериозните недостатъци на калибрацията по СРМ е ограничената наличност на монодисперсни сертифицирани референтни материали, които да се използват като калибранти. Pace et al. [1] прилагат алтернативен калибрационен подход, който позволява охарактеризиране размерите на НЧ без необходимост от СРМ, а именно калибрация по йонни стандарти. Методът се основава на построяване на калибрационна зависимост между сигнала генериран от йонния стандарт и масата на стандарта внесена за времето на интегриране, изчислена съгласно уравнение 5. Приемайки че изследваните наноматериали са със сферична форма от масата може да бъде изчислен съответстващ диаметър на наночастицата съгласно уравнение 4.

Уравнение 5: $m = V \times \eta_t \times C \times t_d$

където: m е маса в fg; V е обемна скорост на пробовъвеждащия поток в ml ms^{-1}; t_d е времето за интегриране в ms; η_t е транспортна ефективност; C е концентрация на йонните стандарти в fg ml^{-1}

За построяване на калибрационната зависимост сме използвали йонни стандарти на сребро в концентрационен диапазон от 10 до 2500 ng L^{-1}, като нивата на йонните стандарти са подбрани така, че масата на Ag въведена за единичен времеви сегмент да съответства на наночастици с диаметър между 8 и 100 nm. Измерването е направено при време за интегриране 5 ms, транспортна ефективност 0.068 и обемна скорост на въвеждания разтвор 0.0342 ml min^{-1} .Регистрираните сигнали и съответстващата им неопределеност са представени в таблица 4.

Concentration, ng L-1	10	20	50	150	500	800	2500
x-SD	11	21	56	181	645	1005	3263
Average count	16	27	66	200	683	1057	3392
x+SD	21	33	76	219	721	1109	3521
SD	5	6	10	19	38	52	129

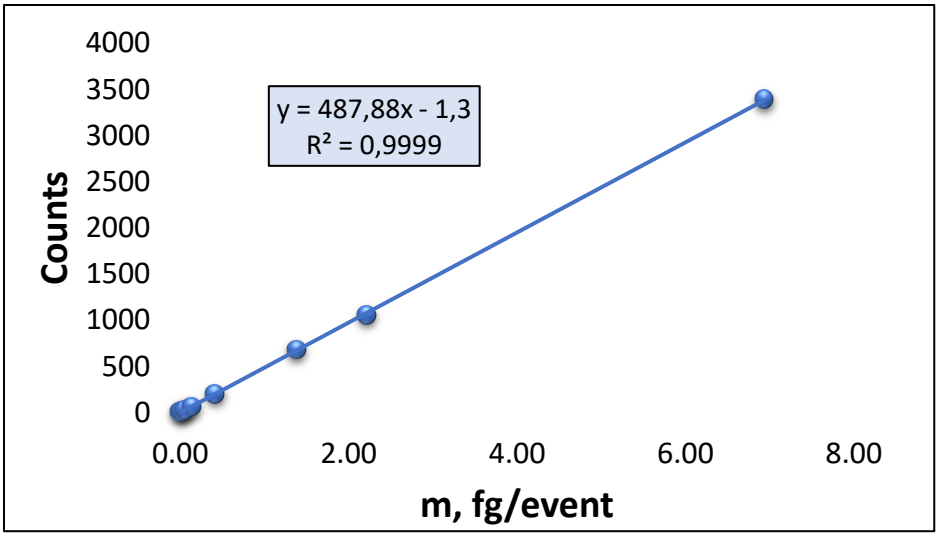
***Таблица 4**. Средна стойност на сигналите, генерирани от йонните стандарти и съответстващата им неопределеност са представени.*

По уравнение 5, сигналите генерирани от йонните стандарти са преобразувани в съответстващата им маса на сребро, попадаща в единичен времеви сегмент на измерването. Изчислените маси са представени в таблица 5:

Conc., ng L-1	10	20	50	150	500	800	2500
m, x+ SD	2,28E-02	4,30E-02	1,14E-01	3,70E-01	1,32E+00	2,06E+00	6,69E+00
Average	3,28E-02	5,53E-02	1,35E-01	4,09E-01	1,40E+00	2,17E+00	6,95E+00
m, x- SD	4,28E-02	6,76E-02	1,57E-01	4,48E-01	1,48E+00	2,27E+00	7,22E+00

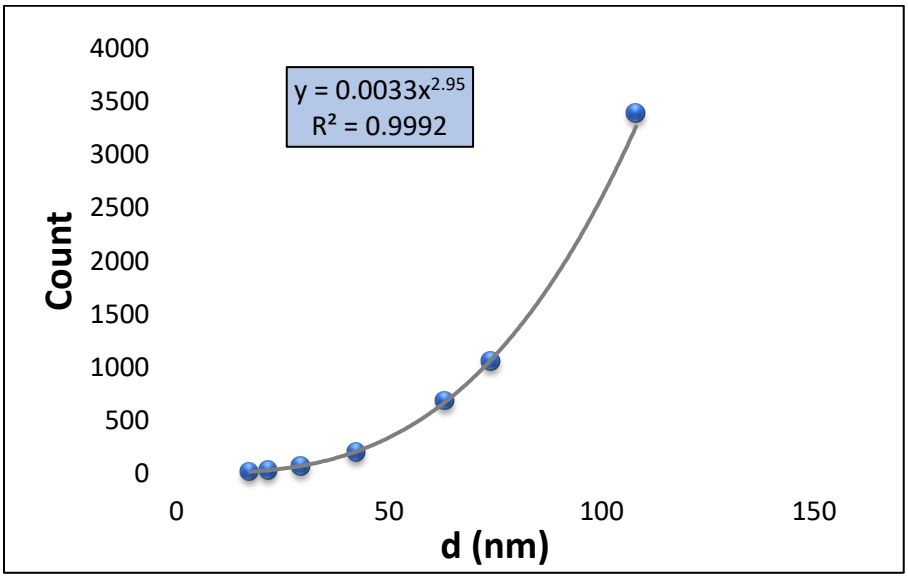
Таблица 5. *Маса на сребро, попадаща в единичен времеви сегмент*

Тъй като стандартното отклонение зависи от броя измервания, съгласувахме обема на обработваната извадка от данни за йонни стандарти с оптималният брой НЧ, регистрирани за цялото време на интегриране (т.е. за статистическа обработка са взети 1200 измервания) и е построена функционалната зависимост: сигнал/маса Ag (фиг. 5)



Фигура 5. *Зависимост на регистрирания сигнал от масата Ag въведена за времето на интегриране (td = 5ms)*

Съгласно уравнение 4, всяка маса е трансформирана в съответстващия й диаметър. Зависимостта сигнал/диаметър на Ag НЧ е представена на фиг. 6



Фигура 6. *Зависимост на регистрирания сигнал от диаметъра на Ag НЧ*

Параметри на функционалната зависимост показват много добро съответствие на експерименталните данни с теоретичния модел за изчисляване на диаметър на сферична наночастица.

Моделът за преобразуване на концентрацията на йонните стандарти в маса на аналита, попадаща в единичен сегмент от измерването е известна в научната периодика, но за първи път предлагаме този подход да се използва за да се оцени приносът на неопределеността на сигнала, към неопределеност на изчисляванияя диаметър на частица, която би генерирала подобен сигнал. За целта определихме средната стойност и стандартното отклонение на регистрираните йонни сигнали и изчислихме диаметъра на НЧ и съответните интервални оценки чрез параметрите на калибрационите зависимости (фиг. 5 и 6). Резултатите са обобщени в таблица 6.

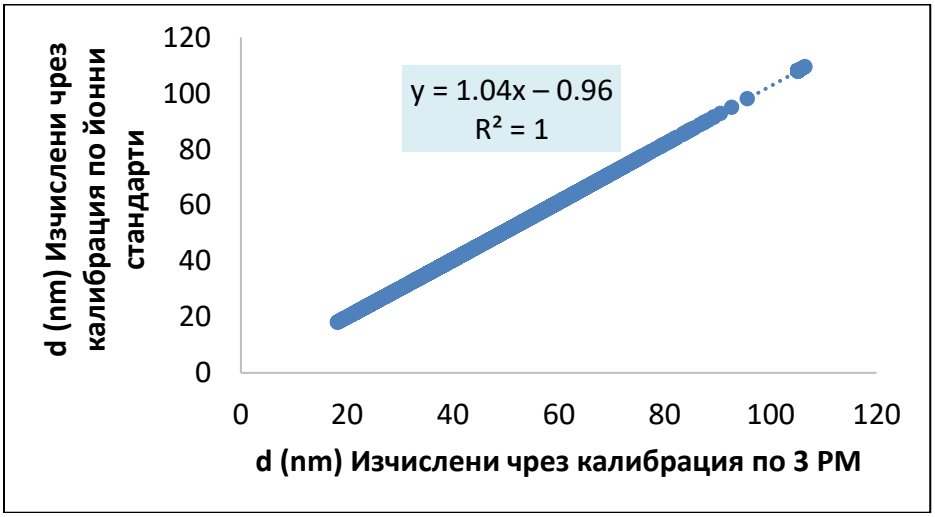
+ SD, nm	1.7	1.5	1.5	1.3	1.2	1.2	1.4
d, nm	18	22	29	42	63	73	108
- SD, nm	2.1	1.7	1.6	1.4	1.2	1.2	1.4

Таблица 6 *Среден диаметър и съответната интервална оценка представена като стандартно отклонение SD*

От представените данни е видна несиметричност на интервалната оценка, която е обусловена от кубичната зависимост между сигнал и диаметър на наночастицата. Тя е ясно изразена при наночастици с диаметър под 60 nm, като се увеличава с намаляване на размера до 18 - 22 nm. Оценката на неопределеността по отношение на диаметъра на наночастиците позволява коректното определяне на разделителната способност на SP-ICP-MS метода при наноматериали с различни размери.

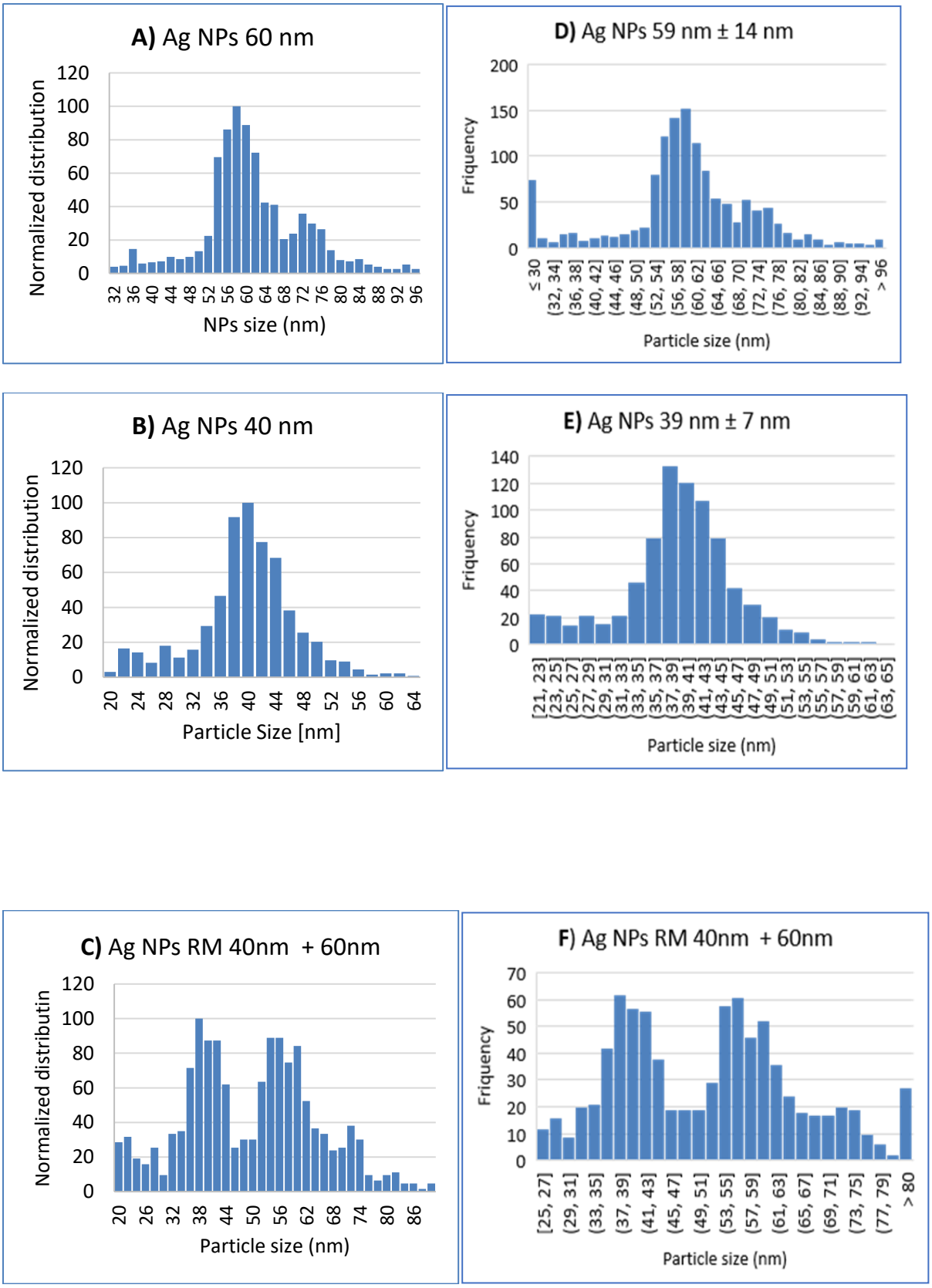
Въз основа на проведените изследване може да се предложи статистически обоснован избор на размера на клъстерите при оценка на разпределението по размери на изследваните НЧ. За Ag НЧ с диаметри под 40 nm размерът клъстерите следва да се увеличи до 3-4nm, докато при частици с d>60 nm, традиционно използваните от специализираните софтуери на ICP-MS инструментите клъстери от 2 nm са статистически обосновани.

Двата подхода за калибрация: 1) по йонни стандарти и 2) по 3 референтни материала с известни диаметри на AgНЧ са приложени за изчисляване на размерите на всички регистрирани наночастици при оптимални фактори на разреждане и еднакви условия за измерване. Съпоставка на получените резултати е представена на фиг. 7. Наклонът на линията (1.04) е индикация, че и двата модела на калибрация дават съпоставими резултати за диаметър на НЧ в целия диапазон от 18-106 nm.



Фигура 7. *Сравнение на резултатите получени за диаметър на наночастиците при калибрация по РМ и калибрация по йонни стандарти*

Въз основа на получените резултати е направено сравнение на разпределението по размери изчислено при калибрация по РМ и калибрация по йонни стандарти. Оценена е способността на калибрацията по йонни стандарти за охарактеризиране на сложни по състав наноколоидни системи, включващи AgНЧ с различни размери. Получените хистограми на разпределение са представени на фиг. 8.



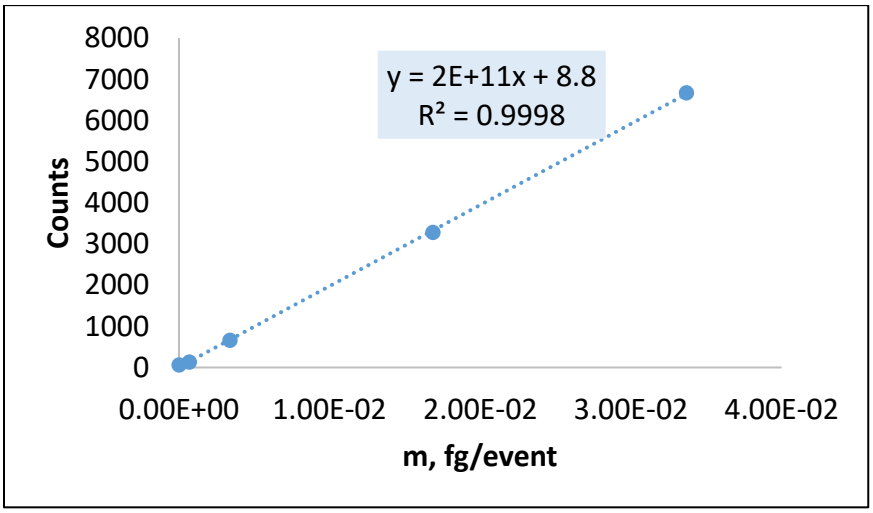
Фигура 8. *Сравнение на експериментално получени оценки за разпределение по размери при индивидуално измерване и едновременно въвеждане на смес от СРМ Ag НЧ. Калибрирането по размери е извършено чрез: референтен материал с известен размер (заложена в софтуера*

на инструмента) - A), B) и C) и калибриране по йонни стандарти на сребро и преобразуване в маса (и диаметър на НЧ)) D), E) и F).

Калибрацията по йонни стандарти намира все по-широко приложени при spICP-MS метода спрямо едноточковата калибрация по СРМ, тъй като позволява да се анализират различни видове наночастици, без необходимост от РМ; дава по-голяма свобода при избора на концентрациите на калибрационните стандарти, генериращи сигнали, съпоставими с тези на наночастиците за дадена проба; позволява по-надеждна оценка на аналитичните характеристики на spICP-MS метода; позволява да се оцени дисперсия на диаметрите, изчислени със spICP-M чрез изчисляване неопределеността на йонните сигнали; йонните стандарти са значително по-евтини и по-стабилни за по-дълъг период от време;

4. Тестване на калибрацията по йонни стандарти при охарактеризиране на НЧ, за който не са налични монодисперсни СРМ.

Едно от основните предимства на калибрирането по йонни стандарти е възможността за анализ на различни НЧ без необходимост от идентичен РМ. За да оценим приложимостта на този подход, използвахме калибрацията по йонни стандарти за охарактеризиране размерите на НЧ от TiO_2 , за които не са налични монодисперсни СРМ. За целта приготвихме суспензия съдържаща TiO_2НЧ на прах с размери на частиците <100 nm. Пробата беше разредена тегловно с DF = $1.5x10^7$ и хомогенизирана на УЗ вана за 10 мин непосредствено преди анализът. За построяване на калибрационната зависимост сигнал/маса са използвани стандартните разтвори на Ti в концентрационен диапазон от 1 до 10 ng L^{-1}. Генерираните сигнали са трансформирани в съответните маси на ^{48}Ti попадащи в единичен времеви сегмент по уравнение 5. Анализът е извършен при време за интегриране 5 ms и дебит на пробовъвеждащия поток 0.367 ml min^{-1}. Оценката на транспортната ефективност (0.066) е направена по сертифициран референтен материал от AgНЧ с концентрация 20 ng.L^{-1} и диаметър 40 nm ± 6. Зависимостта генериран сигнал/маса за ^{48}Ti е представена на фиг. 9.

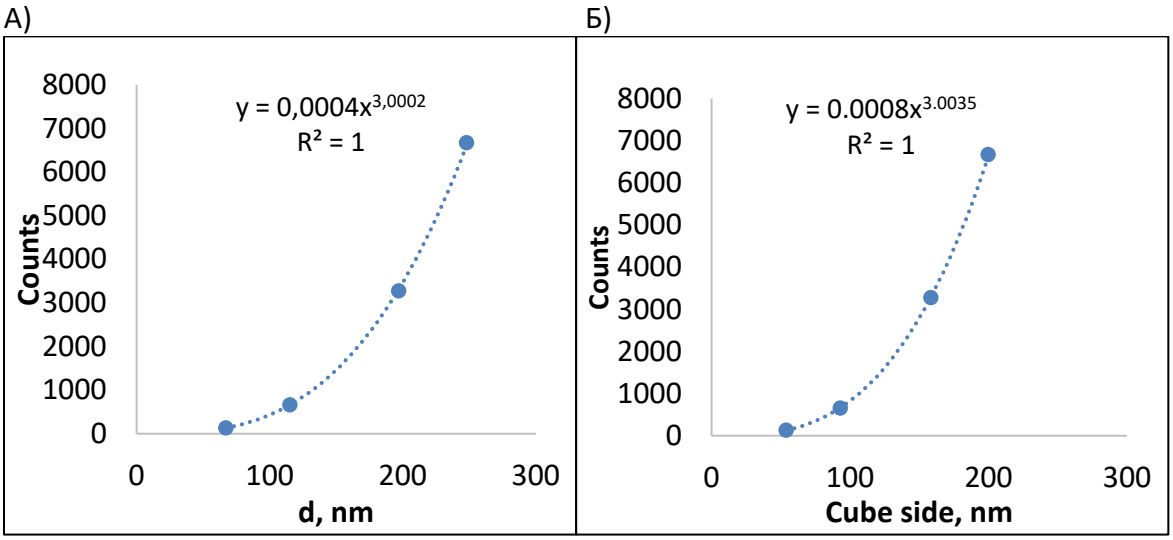


Фигура 9. *Зависимост на регистрирания сигнал от масата Ti въведена за времето на интегриране.*

4.1 Охарактеризиране размерите и разпределението по размери на TiO_2НЧ

В основите на spICP-MS метода е заложена идеята, че анализираните НЧ имат сферична форма, въз основа на което за изчисляване диаметрите на анализираните НЧ, специализираният софтуер използва зависимостта маса/диаметър за сферични НЧ. Тъй като в литературната периодика съществуват данни за наночастици от TiO_2 с кубична форма, за коректното определяне на размерите и разпределението по размери тествахме два математически модела в зависимост от формата на наничастиците. За НЧ със сферична форма изчислените маси бяха преобразувани в съответстващите им диаметри по уравнение 6, а за НЧ с кубична форма – съответно уравнение 7. Получените калибрационни криви за сигнал / диаметър са показани на фиг. А) и Б).

Уравнение 6 : $d_p = 10^5 \times \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} \times \frac{m_{p_n}}{\rho_p}}$ ***Уравнение 7:*** $a_p = 10^5 \sqrt[3]{\frac{m_{p_n}}{\rho_p}}$



Фигура 10. *Зависимост на регистрирания сигнал от диаметъра на TiO_2 НЧ изчислен за А) НЧ със сферична форма и Б) НЧ с кубична форма.*

От получените резултати може да се види, че експерименталните данни за двата математически подхода показват добро съвпадение с теоретичния модел за определяне размерите на НЧ.

На следващият етап от изследването беше изчислена неопределеността на получените по двата модела диаметри. За целта от параметрите на регресионното уравнение от фигура 9 са изчислени стандартните отклонения на измерените сигнали за всички йонни стандарти и са трансформирани в съответстващите им диаметри. Резултатите са обобщени в таблица 7.

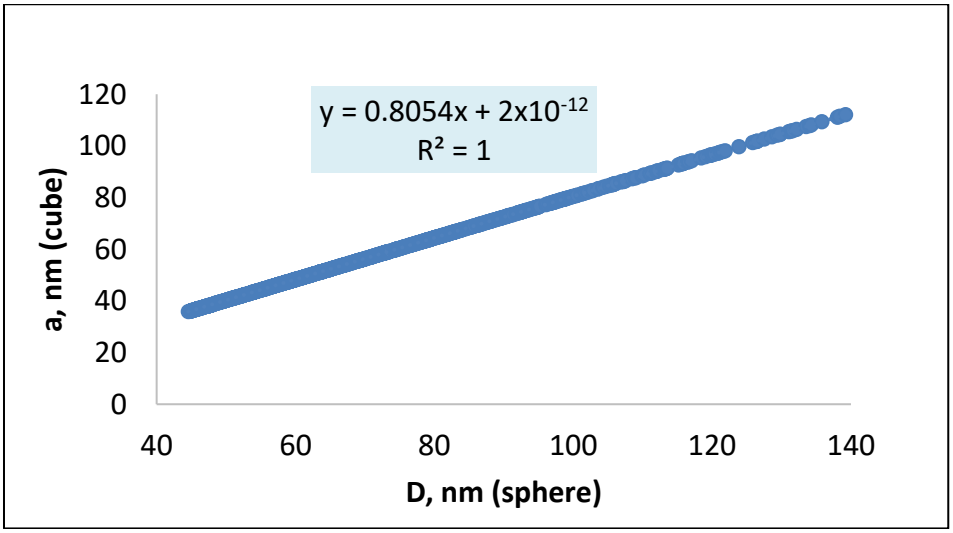
+SD, nm	1.3	2.5	2.6	2.9
d*, nm	67	115	197	249
-SD, nm	1.4	2.7	2.7	3.0

+SD, nm	1.1	2.0	2.1	2.3
a, nm**	54	93	158	201
-SD, nm	1.1	2.1	2.1	2.4

Таблица 7. *Среден диаметър и съответната интервална оценка представена като стандартно отклонение SD, където d* – диаметъра на сферична наночастица, а а** е страна на куб.*

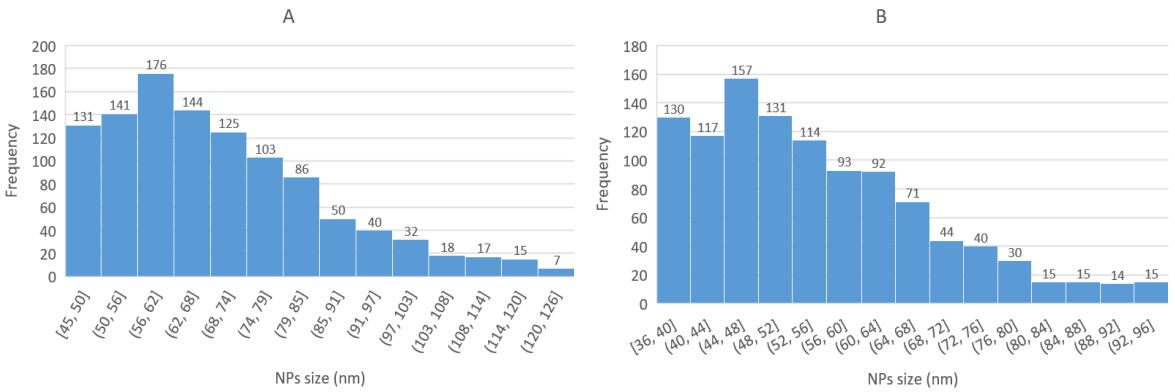
Изчисленото стандартно отклонение за двата математически модела е в съответствие с кубичната зависимост сигнал/диаметър, което води до по-изразена асиметрия в интервалната оценка на неопределеността с намаляване на размера на частиците. Оценката на неопределеността позволява статистически обосновано групиране на разпределението по размери на TiO_2НЧ, а именно: 4 - 5 nm за d> 90 nm.

За изчисляване размерите на TiO_2НЧ в анализираната проба бяха приложени и двата математически модела. Получените резултати са сравнени на фиг. 11. Наклонът на линията показва, разлика в получените размери, изчислени за сферични и кубични НЧ ~ 20%, която се обуславя от самият модел.



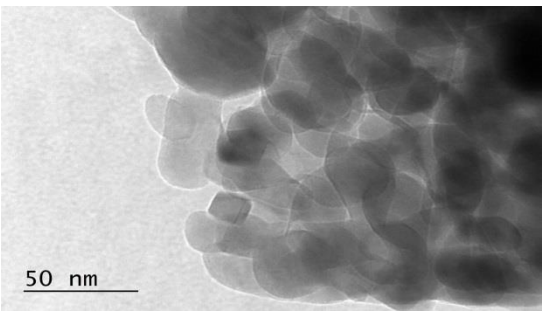
Фигура 11. *Сравнение на резултатите получени за диаметри на наночастиците по двата математически подхода*

Въз основа на експериментално получените данни за стандартно отклонение е направено сравнение на разпределението по размери за двата математически подхода. Хистограмите на разпределението по размери за НЧ със сферична и НЧ с кубична форма са представени на фиг. 12



Фигура 12. *Сравнение на експериментално получени оценки за разпределение по размери на НЧ от TiO_2 за А) сферични наночастици и Б)наночастици с кубична форма.*

С цел избор на подходящ математически модел, както и валидиране на метода за охарактеризиране размерите и разпределението по размери чрез калибрация по йонни стандарти суспензията, съдържаща TiO_2 беше анализирана с трансмисионен електронен микроскоп (TEM). Резултатите от TEM са представени на фиг 13.



Фигура 13. *Изображение на TiO_2 НЧ направени с TEM*

От направените снимки можем да заключим, че в пробата съдържаща TiO_2 НЧ присъстват частици както с кубична и сферична форма, така и с форма на паралелепипед, което може да е резултат от агрегация на НЧ.

4.2. Определяне аналитичните характеристики на метода

Оценихме параметрите на разпределението – среден размер, медиана и мода, както и някои аналитични характеристики на метода като LOD и BED. BED и LOD са изчислени като средна стойност съответно на йонния сигнал и граничния сигнал (средна стойност на йонния сигнал +3*SD) и са трансформирани в съответстващите им диаметри по уравнение 6 и 7. Изчисляването и на двете величини изисква най-напред да се изчислят масите съответстващи на регистрираните сигнали по уравнение 5. Получените резултати са представени в таблица 8.

	Среден размер	Медиана	Мода	LOD	BED
Сфера	69	66	48	42	34
Куб	55	53	46	34	28

Таблица 8. *Оценка на параметрите на разпределението по размери.*

1. Heather E. Pace, Nicola J. Rogers, Chad Jarolimek, Victoria A. Coleman, Christopher P. Higgins, James F. Ranville, Determining Transport Efficiency for the Purpose of Counting and Sizing Nanoparticles via Single Particle, American Chemical Society, 83, 24, 9361-9369 (2011)
2. Francisco Laborda, Javier Jiménez-Lamana, Eduardo Bolea and Juan R. Castillo: Critical considerations for the determination of nanoparticle number concentrations, size and number size distributions by single particle ICP-MS, J. Anal. At. Spectrom., 28, 1220-1232 (2013)

01.04.2020 г. Докторант:.....

гр. Пловдив / Лидия Кайнарова/

Научни ръководители:.....

/ доц. д-р Виолета Стефанова /

.....

/гл. ас. д-р Деяна Георгиева /

Ръководител катедра:.....

/ доц. д-р Кирил Симитчиев/

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 под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 09.04.2020 г., бе разгледан ***отчетът на редовен докторант Гергана Илиева Танчева за първата година от докторантурата ѝ***. В заседанието участва научният ръководител на докторанта – доц. д-р Николай Кочев. Научният ръководител запозна членовете на катедрата със становището си относно извършените дейности от докторанта и предложи оценка Отличен (6) за първата година на докторантурата. След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научния ръководител бяха единодушно приети с 11 гласа „за“.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчетът на Гергана Илиева Танчева с оценка Отличен (6).

Прилагам:

1. Препис-извлечение от катедрения съвет;
2. Отчет на докторанта;
3. Мнение на научния ръководител.

09.04.2020 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”,
от 09.04.2020

ПРОТОКОЛ № 4

На 09.04.2020 г. се състоя заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 13

В конферентната връзка участваха: 11

Не участваха гл. ас. д-р Е. Върбанова и проф. д.н. П. Пенчев по уважителни причини

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Гергана Илиева Танчева за първата година от редовната ѝ докторантура. На заседанието взе участие научният ѝ ръководител доц. д-р Николай Кочев. Доц. д-р Николай Кочев запозна членовете на катедрата със становището си на научен ръководител. След дискусия, отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Отличен (6) за извършените дейности от докторанта.

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Гергана Илиева Танчева за първата година от редовната ѝ докторантура с оценка Отличен (6).

09.04.2020 Протоколчик:

/гл. ас. д-р С. Цонева/

МНЕНИЕ

за работата на **Гергана Илиева Танчева**

редовен докторант при Химически факултет, катедра Аналитична химия и компютърна химия

Период: 01.03.2019-01.03.2020

Докторант Гергана Танчева работи усърдно и дисциплинирано по изпълнението на задачите от плана за първата година от докторанската програма. Гергана Танчева успешно изпълни всички задачи от учебната, научно-методическата и научно-изследователската дейности. През изминалия период докторант Танчева повиши своите компетенции в основните области касаещи тематиката на дисертацията, усвои умения за работа с няколко софтуерни платформи за QSAR/QSPR моделиране и обработка на химични субстанции, направи обстоен литературен обзор и последващ анализ. През първата година от работата по дисертацията си, Гергана Танчева извърши огромна по обем работа, включваща конфигуриране на процедурите по импорт в химични бази данни на повече от 1000 excel файла с експериментални данни за наноматериали. Докторант Гергана Танчева представи два постера на научни форуми в ПУ „Паисий Хилендарски“.

Въз основа на показаните резултати от първата година, препоръчвам катедрения съвет на катедра Аналитична химия и компютърна химия да даде на докторант Гергана Танчева оценка **Отличен**.

02.03.2020 г. Научен ръководител: .....

гр. Пловдив /доц. д-р Николай Кочев/

ПОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ “ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”

ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

ГОДИШЕН О Т Ч Е Т

от Гергана Илиева Танчева - редовен докторант при Химически факултет,
катедра “Аналитична химия и компютърна химия”
за периода 03.2019 - 03.2020 г.

дата на записване в докторантура – 01.03.2019 г., Заповед № Р33 – 936 от 20.02.2019г
Област на висше образование - 4. Природни науки, математика и информатика,
Професионално направление - 4.2 Химически науки, докторска програма -
Теоретична химия

Тема на дисертационната работа:
„Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали“

Утвърдена от ФС, протокол № 205 от 14.02.2019 г.

I. Обучение

1. Участвах в уебинар на US-Nano-WG и слушах лекция на тема “Findable, Accessible, Interoperable ,Reusable (FAIR)” sharing of nanosafety data с лектор Dr. Egon Willighagen, Maastricht University, която се проведе на 04.04.2019 г.
2. Участвах в електронно обучение на тема Machine learning with Python към SimpliLearn.
3. Посетих лекционен курс на тема „Въведение в невронни мрежи с Python“ проведено във факултета по математика и информатика с лектор Мирослав Трънков, за периода 28-29.09.2019 г.

II. Участие в научни форуми и разпространение на научни резултати

1. С помощта на научния ми ръководител кандидатствах и бях одобрена за участие в програмата Transnational Access (TA) към проекта NanoCommons (HORIZON 2020 EU, agreement #731032). Темата на одобрения проект по TA-NanoCommons е „Ontology annotation of nanomaterial safety data to support semantic data integration and analysis“.
2. Взех участие в научна конференция на тема „Актуални регулативни изисквания към химичния анализ и модерни инструментални технологии за тяхното покриване“ Пловдив 2019 година, организирана от Химическия факултет на ПУ "Паисий Хилендарски" със съдействието на АСМ2, която се проведе на 12.06.2019 г. в Ректората на ПУ "Паисий Хилендарски". Представихме постер на тема „Обработка на данни за химически вещества и наноматериали”.
3. Взех участие в Пета научна конференция за студенти, докторанти и млади учени “Предизвикателства в химията“, която се състоя в ПУ „Паисий Хилендарски“ на 22-

23 октомври 2019г. Беше представен постер на тема „QSAR modeling of melting points of organic compounds. Methods comparison.”

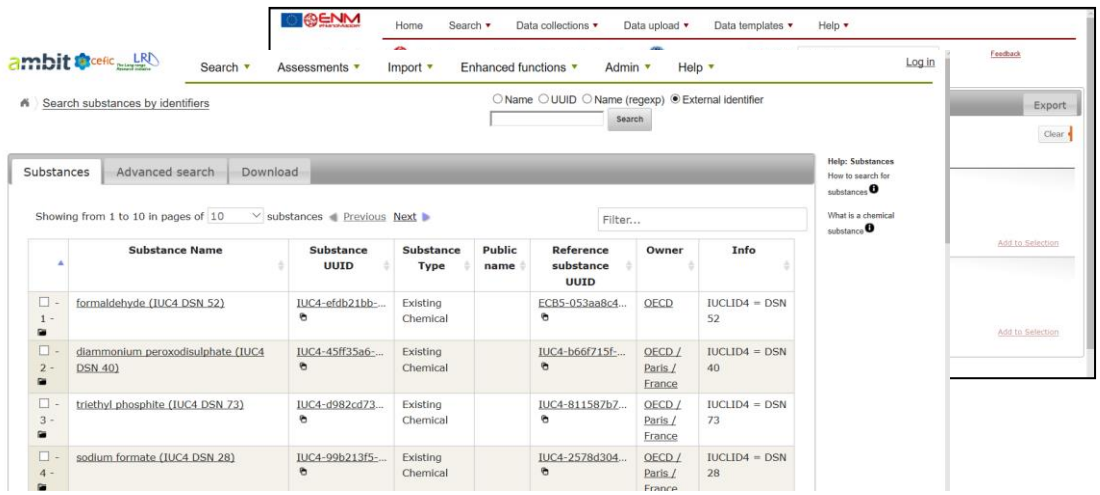
III. Работа по дисертацията

1. Преглед и обобщение на научните публикации на теми:
   - ✓ Химични структури и вещества. Наноматериали. Регулации. Дефиниции.
   - ✓ Компютърно представяне на химичните обекти.
   - ✓ Третирането на субстанциите в съвременните химични бази данни, съвременните модели за бази данни и мета данни за наноматериали. Автоматично изчистване на данни, стандартизация, нормализация.
   - ✓ Стандартни и съвременни методи за QSPR/QSAR моделиране. Изчисляване и селекция на молекулни дескриптори.

2. Избор на базов модел за представяне на химични субстанции и нано-форми на субстанциите и избор на софтуерна платформа за реализация на модела за представяне на химични субстанции.

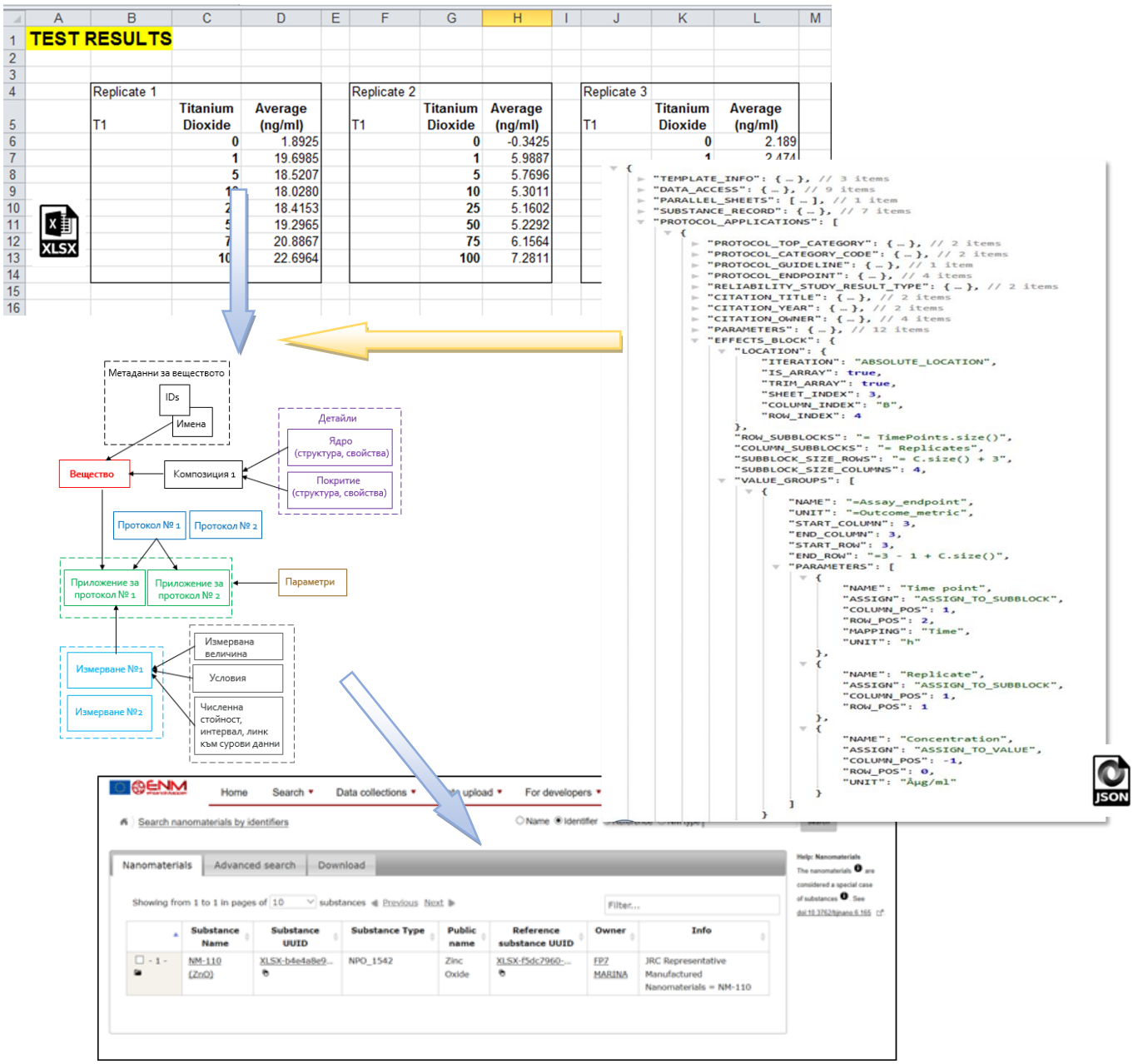
В основата на QSAR/QSPR моделите, както и в повечето публични бази данни, молекулите се представят с класическия модел на триадата – (структура, дескриптори, свойства). От друга страна, регулаторните органи изискват информация за производствените химични вещества, не като единични химични структури. Представянето на наноматериалите в химичните бази данни е основна тема в бързо развиващото се поле на наноинформатиката. Съставът на наноматериалите изисква описание на много компоненти и сложни връзки между тях.Управлението на данните за наноматериалите е затруднено поради липсата на съгласувано представяне на наноматериалите. Линейни нотации като SMILES, InChi и графично представяне на структурите са неподходящи за представянето им.

Моделът за данни разработен от IdeaConsult, реализиран в базата данни на Ambit/eNanoMapper предлага нова парадигма в представянето на информацията за химични вещества и материали. Ambit е отворен софтуер за химична информатика, предназначен да подпомага и улеснява компаниите при подготовката на химична информация нужна за оценка на химичната безопастност, напълно съвместим с досиетата изискуеми от регламента REACH. Използва се за интегрирането на голям набор от данни за физикохимични свойства и биологична активност на наноматериалите, генерирани от предишни проекти на NanoSafety Cluster. Този модел също се използва успешно за обработка на химични вещества и данни за безопастност в досиетата REACH.



Данните за безопастността на наноматериалите се представят в различни шаблони на електронни таблици. Основните темплейти използвани за данни са два вида. Темплейти разработени от JRC (Joint Research Centre) на Европейстката комисия и такива създадени от IOM (Institute of Occupational Medicine, UK). Темплейтите разработени от JRC описват физико-химични характеристики и са използвани в проекти NanoReg и NanoReg2. Всеки excel файл може да съдържа повече от един анализ измерващ една и съща физико-химична характеристика. Темплейтите създадени от IOM са използвани от редица европейски проекти. Изградени са основно от мета данни, сурови данни и обобщение на данните.

Базата данни eNanoMapper използва JSON конфигурация за преобразуване и въвеждане на данните и от двата вида електронни шаблони. Конфигурационните JSON файлове следват модела на данни инмплементиран в базата данни на eNanoMapper.



✓ До момента съм конфигурирала около 1400 файла с данни, предоставени от различни партньори, участващи в различни проекти. Някои от проектите са NanoTest, NanoReg, NanoReg2, MARINA, ENPRA, финансирани от седма рамкова програма 2007 на ЕС. Конфигурирани са темплейти от редица различни анализи, някои от които са клетъчна жизнеспособност, оксидативен стрес, имунотоксичност, in vivo/in vitro токсичност, различни измервания за екотоксичност, както и физико-химични анализи. Анализи са правени върху различни наноматериали, включително въглеродни нанотръби, сребърни наночастици, цинкови, титаниеви диоксиди, железни, цериеви оксиди, такива с различно покритие на ядрото и без покритие.

✓ Започнахме подготовка на текстове, фигури и данни за статия, засягаща темата за конфигуриране и импортиране на данните за безопасност на наноматериалите към базата данни на eNanoMapper

3. Избор на колекция с химични субстанции, изчистване на аномалии, избор на целево свойство за моделиране и първоначални QSAR/QSPR модели.

✓ <u>Избор на целево свойство за моделиране.</u>

С увеличаването на броя и количеството произвеждани химикали, се увеличава и риска за излагане на хора и животни на потенциално вредни вещества. Поради ограниченията свързани с време, разходи и проблемите свързани с хуманното отношение към животните, повечето от тези химикали нямат експериментално измерени стойности. Температурата на топене е важен параметър за околната среда, който влияе на разтворимостта на веществата. В индустриален аспект, температурата на топене дава индикация за чистотата на произведеното вещество. Температурата на топене на молекулата е едно от физико-химичните свойства, изисквани от регламента REACH (Регистрация, Оценка, Разрешаване и Ограничаване на Химическото регулиране) на Европейската комисия. Температурата на топене бе избрана за целево свойство за моделиране.

✓ <u>Използване на специализирани софтуерни пакети по химична информатика и data mining.</u>

Първоначално се запознах с различни софтуерни модули за моделиране и обработка на данни.

- <u>KNIME</u>-софтуер за обработка и анализ на данни. Интегрира различни компоненти за machine learning и data mining.
- <u>Weka</u> - съвкупност от алгоритми за машинно обучение за извличане на данни. Той съдържа инструменти за подготовка, класификация, регресия, клъстеринг, извличане на правила за асоцииране и визуализация.
- <u>Jyputer notebook</u> (електронен бележник) – python базирано приложение с отворен код, което позволява създаване и споделяне на документи, уравнения, визуализация на данни и текст чрез web интерфейс. Jyputer notebook ще се използва за: изчистване и трансформация на данни, числено симулиране, статистическо моделиране, визуализация на данни, машинно обучение.

- OpenBabel - набор от химически инструменти, който позволява преобразуване, анализиране и съхранение на данни от химични структури.
- Padel – софтуер за изчисляване на молекулни дескриптори.

✓ Избор на основно множество от съединения със стойности на целевото свойство.

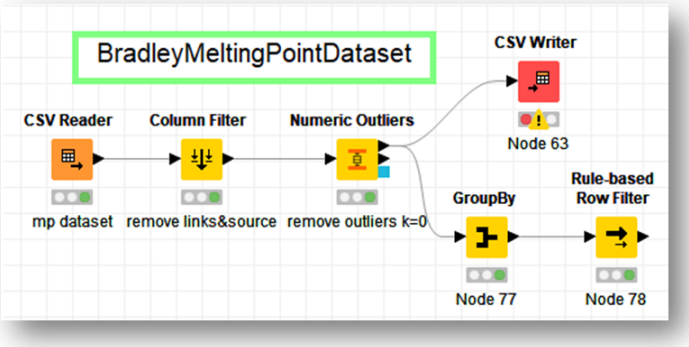
Първият основен етап от процеса на моделиране е създаването на основно множество от съединения с експериментално определени стойности на целевото свойство. Експерименталните данни за температура на топене за първата извадка са взети от отворена колекция данни на Jean-Claude Bradley Open Melting Point Dataset, като използвахме версия 2 от 20.07.2012 г. с име ONSM029 съдържаща 2706 структури. Също така използвахме и по-голяма извадка с 28 646 структури. И в двете използвани извадки структурната информация е представена чрез линейна нотация SMILES.

Таблица 1. Основни характеристики на използваните извадки за моделиране.

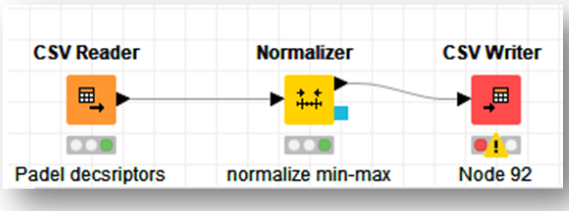
Източник	https://figshare.com/articles/ONS_Open_Melting_Point_Collection/93086	https://figshare.com/articles/Jean_Claude_Bradley_Open_Melting_Point_Datset/1031637
Брой структури	2706	28 645
Средна стойност	60.37 ^{o}C	95.18^{o}C
Стандартно отклонение	93.65^{o}C	97.18^{o}C
Минимална стойност	-187.75^{o}C	-205°C
Максимална стойност	437.65^{o}C	804°C

✓ Предварителна обработка на данните и изчисляване на дескриптори.

Структурите са представени със SMILES линейна нотация, което не гарантира уникалността на всяка структура. Софтуерът OpenBabel бе използван за конвертиране на SMILES в InChi като уникална линейна нотация, използвана за проверка на дублиращи се структури. Платформата KNIME v.3.7.1 бе използвана за разработване на работен поток (workflow) за предварителна обработка на данните. След откриване на дублиращите се структури, измежду тях се идентифицират „бегълци“, и след отстраняването на „бегълците“ се изчислява средната температура на топене на останалите дубликати.



С помощта на PaDEL-Descriptor v.2.21 са изчислени 1444 2D молекулни дескриптора. Използван е софтуер WEKA v.3.8.3 за първоначална филтрация на изчислените дескриптори и последващо селектиране. Използваният филтър RemoveUseless премахва атрибутите (дескрипторите), които изобщо не се различават по стойности или които варират твърде малко. Всички константни атрибути се изтриват автоматично, заедно с всички, които надвишават максималния процент на параметъра на дисперсия (тестът за максимална дисперсия се прилага само за номинални атрибути). Премахват се дескриптори, които са константни или близки до константа. Филтрите използвани за селектиране са CfsSubsetEval и Bestfirst. CfsSubsetEval оценяват стойността на подмножество от атрибути, като се взема предвид индивидуалната способност за предсказване на всеки елемент, заедно със степента на „излишък“ между тях. Предпочитат се подмножества от атрибути с характеристики, които са силно свързани с целевото свойство и без интер-корелация между тях. За модели изискващи нормализиране на дескрипторите в KNIME v.3.7.1 е разработен допълнителен работен поток.



✓ <u>Създаване и валидиране на модели предсказващи температура на топене на органични съединения.</u>

След предварителна обработка на данните, пристъпихме към разработване на модели за предсказване на температури на топене. За целта бяха използвани софтуерния модул GCM2 разработен по проект в ПУ “Паисий Хилендарски“ и софтуера WEKA.

За разработването на модели за предсказване на температурата на топене на органични вещества с GCM2 е използвана извадката с 2706 органични структури. Използвани са 30 външни дескриптора, локалните атомни дескриптори са дефинирани чрез атомна конфигурация A<H>. Софтуерът GCM2 има собствена процедура за изчистване на дескриптори (параметърът threshold [r] дефинира кои колони в работните матрици да се филтрират), която процедура е прилагана върху матриците от

фрагментирането за адитивните схеми. Най-добри резултати бяха постигнати с модела Second order (A<H>; 30 външни дескриптора), r=0.04, представени в таблица 2.

Таблица 2. Създаване и валидиране на модел предсказващ температура на топене на органични съединения с GCM2

		r^2	R_c^2	Q^2 / R_{ys}^2	RMSE	MAE
Second order (A<H>; 30 external descriptors) r=0.04	*Model building*	*0.79*	*0.79*	*0.038*	*42.73*	*32.78*
	Model validation	**0.76**	**0.75**	**0.75**	**46.35**	**34.55**

Използвахме и външния софтуер WEKA v.3.8.3 за тестване на различни модели за предсказване на температура на топене. При тестване на различните модели са използвани и двете извадки с данни. Поради дублиращи се структури, извадката с 28645 структури бе предварително обработена в KNIME, както е описано в точка 4. Изпробвани са различни модели като линейна регресия, метод на най-близния съсед, метод на опорните вектори, невронна мрежа.

✓ Оптимизиране на моделите получени с двата различни софтуера.

Най-добри статистически характеристики показа моделът базиран на метода на най-близкия съсед, създаден с помощта на софтуера WEKA, поради това и насочихме усилията си към подобряване на характеристиките му представени в таблица 3. Предварително използваните дескриптори бяха нормализирани с разработения в KNIME работен поток.

Таблица 3. Създаване и валидиране на модел предсказващ температура на топене на 20287 съединения с WEKA

		r^2	MAE	RMSE	RAE	RRSE
weka.classifiers.meta.AttributeSelectedClassifier -E "weka.attributeSelection.CfsSubsetEval -P 1 -E 1" -S "weka.attributeSelection. BestFirst -D 1 -N 5" -W weka.classifiers. lazy.IBk -W 0 -A "weka.core.neighboursearch. LinearNNSearch -A \"weka.core.ManhattanDistance – R first-last\"" Instances: 20287	Training set	0.87	32.83	44.98	44.17	48.64
	CV-10folds K-11	**0.86**	**34.08**	**46.84**	**46.49**	**50.65**

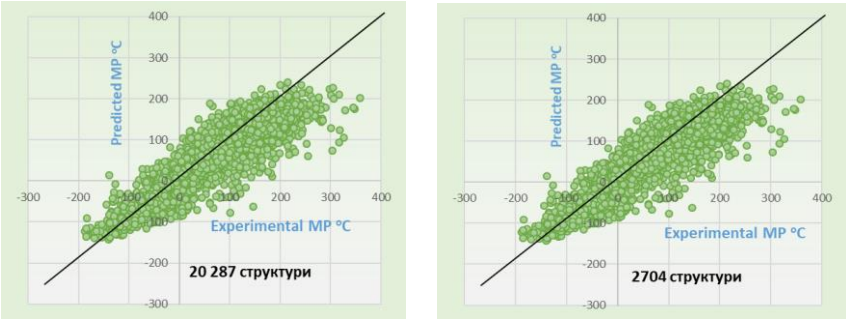
.

След като бе избран модела с най-добри статистически характеристики бе тестван с извадката с 2706 структури, представен в таблица 4.

Таблица 4. Създаване и валидиране на модел предсказващ температура на топене на 2704 съединения с WEKA

		r^2	MAE	RMSE	RAE	RRSE
weka.classifiers.meta.AttributeSelectedClassifier -E "weka.attributeSelection.CfsSubsetEval-P 1 -E 1"-S "weka.attributeSelection.BestFirst-D1-N5"-W weka.classifiers.lazy.IBk -- -K 11 -W 0 -A "weka.core.neighboursearch.LinearNNSearch -A \"weka.core.ManhattanDistance -R first-last\"" Instances: 2704	Training set	0.90	30.65	41.23	41.67	44.07
	CV-10folds K-11	**0.88**	**32.39**	**44.41**	**44.02**	**47.45**

На фигура 1 са съпоставени предсказаните и експерименталните резултати за температура на топене за двете извадки получени с WEKA.



Фигура 1. Визуални сравнение експерименталните и предсказаните резултати от моделите за температура на топене

Оптимизирахме модела получен с модула GCM2, като към него прибавихме индексък на Уинер и молекулната маса като външни дескриптори. Използвахме и различни структурни фрагменти като корекционни фактори (представини по-долу в секцията Correction factors), при които се наблюдава най-голямо отклонение при прогнозните температури на топене.

```
Local descriptors: A,H
Correction factors:
G(C=CC),G(c),G([*;r3]),G(C#C),G(O=C[OH]),G(O=C=S),WI>>pow(0.25)
Global descriptors: MATS2c,MATS1v,SHaaNH,VE2_Dzs>>pow(0.25),VCH-
4,ASP4,SHBd,SHdCH2,minHBd,maxHdCH2,maxsssCH,ETA_Shape_Y>>pow(0.25),ETA_BetaP_s,MDE
N11,MDEN13,MLFER_A,MLFER_S,piPC1,piPC2,n4Ring,JGI5>>pow(0.25),JGI6>>pow(0.25),mw>>
ow(0.25)
Column filtration threshold: 0.022
Target property: mp
Validation: Self,LOO
GCM type : SECOND_ORDER
```

Работата по оптимизиране на модела продължава. Проверихме влиянието на матрицата на корекционните фактори, получена от модела с GCM2, като външен дескриптор, за подобряване на модела с метода на най-близкия съсед. Получените резултати са представени в таблица 5.

Таблица 5. Оптимизиране на модела с метода KNN с използване на различни молекулни фрагменти от GCM2

	r^2	MAE	RMSE	RAE	RRSE
Model building	0.89	32.06	44.18	43.59	47.22
Model validation cv 10 fold	0.87	35.77	49.26	48.62	52.64

01.03.2020г. Докторант:.....

гр. Пловдив / Гергана Танчева/

Научен ръководител:.....

/ доц. д-р Николай Кочев /

Ръководител катедра:.....

/ доц. д-р Кирил Симитчиев/

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

Д О К Л А Д

от доц. д-р Нина Димчева
ръководител катедра Физикохимия

Уважаеми г-н Декан,

Моля да внесете във Факултетния съвет за обсъждане и утвърждаване на Годишен отчет от докторант Мария Г. Пимпилова за периода (01.03.2019 – 01.03.2020 г.). Отчетът на докторантката е обсъден и приет на заседание на катедрения съвет към кат ФХ от 06.03.2020 г.

Катедреният съвет на кат. ФХ се солидаризира с научния ръководител на докторантката доц. д-р Н. Димчева и единодушно прие предложената ОТЛИЧНА оценка за работата на докторант Пимпилова за последната година.

Към настоящия доклад прилагам препис-извлечение от протокола на катедреното заседание и становището на научния ръководител доц. д-р Н. Димчева.

13.03. 2020 г.
Пловдив

Р-л. катедра:
/доц. д-р Н. Димчева/

Препис- извлечение
от заседание на кат. Физикохимия

П Р О Т О К О Л № 4

Днес, 06.03.2020 г. в катедра Физикохимия се проведе Катедрен съвет.

Присъстват: доц. д-р Н. Димчева, проф. дхн В. Делчев, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Д. Петров, ас. П. Певичаров, ас. В. Колчева, М. Пимпилова, хим. М. Георгиева, хим. Н. Делчева.

Отсъства: Хр. Кръстева (в лекции).

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Кадрови

По т.1.1. доц. Н. Димчева даде думата на докторант Мария Пимпилова да представи Отчета си за периода 01.03.2019 – 01.03.2020 г.

След зададените въпроси и събеседвания членовете на КС дадоха положителна оценка на докторант Мария Пимпилова, с научен ръководител доц. д-р Н. Димчева и всички гласуваха за приемане на Отчета през първата година. Гласувана е оценка за работата – „ отличен“.

По т.1.2.....

По т.2.1.....

По т. 2.2.....

06.03.2020 г.

Протоколчик:
(М. Георгиева)

До Декана
на Химически факултет
ПУ „Паисий Хилендарски“

ГОДИШЕН ОТЧЕТ
от Мария Генова Пимпилова, редовен докторант към катедра Физикохимия
за извършената работа по дисертационния труд на тема: „Разработване и охарактеризиране на модифицирани електродни материали“
за периода 1.03.2019г. – 1.03.2020г.

Уважаеми г-н Декан,

През първата година на обучението ми в докторска програма по Физикохимия съм извършила следните дейности:

I. Учебна и педагогическа дейност:

1. Посещавала съм:

- Семинари по факултативната дисциплина „Английски език за химици“ с лектор доц. д-р Нина Димчева. Получен сертификат при завършване на курса.
- Лекции и лабораторни упражнения по специализиращата дисциплина „Биокатализ и биоелектрохимия“ с ръководител доц. д-р Нина Димчева – сертификат. /Дисциплината е заложена в индивидуалния ми план за втората година./

2. Подготвила съм и съм провела упражнения по Електрохимични методи за анализ със студенти, IV курс от специалности „Анализ и контрол“ и „Медицинска химия“ – общо 50 ч.

3. Положила съм изпит по специалността (докторантски минимум) на 16.01.2020 г., с успех отличен 5.50.

II. Работа по дисертацията.

1. Извършила съм проучване на научната литература по проблематиката на дисертацията, използвайки базите данни - Scopus, Web of Science, и Google Scholar.

2. Инсталирала съм и съм разучила специализирания библиографски софтуер Mendeley (свободна програма за организация на събраната информация) и съм създала сбирка от статии, свързани с тематиката на дисертацията, която периодично актуализирам.

3. Запознала съм се и съм се обучила да работя със специализирана електрохимична апаратура и нейния софтуер, която използвам при експерименталните изследвания PSTrace 2.1 и програмата OriginLab (версия 7.5) за построяване и на графики по експериментално получени данни.

4. Теоретично съм изучила:

4.1. Съвременни и класически електрохимични методи – импулсни волтамперометрични методи; потенциодинамичните методи линейна и циклична волтамперометрия, както и потенциостатичния метод амперометрична детекция.

4.2. Част от препаративните техники за имобилизиране на ензими върху проводящи материали – адсорбция, ковалентно свързване и включване в полимерни филми.

5. Усвоила съм на практика и прилагам и анализирам самостоятелно следните електрохимични методи:

- амперометрична детекция;
- линейна и циклична волтамперометрия;
- импулсни волтамперометрични методи - диференциална импулсна волтамперометрия DPV и квадратно вълнова волтамперометрия SWV;
- обработвам самостоятелно апаратните записи на посочените методи.

III. Експериментална работа:

Във връзка с темата на дисертацията извърших електрохимично модифициране на графитови и стъкловъглеродни електродни повърхности с Pd, Pt и Au посредством електрохимична редукция на йоните на тези метали при постоянен потенциал (потенциостатично отлагане).

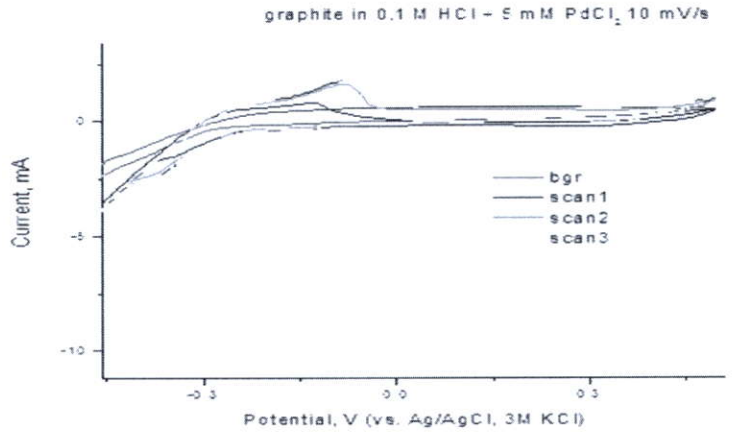
1. Използвани процедури и методи:

Електродните повърхности представляват дискове от спектрално чист графит с диаметър 0,5 см, обвити с тефлонова изолация или дискове от стъкловъглерод с диаметър 3 мм, изолирани с химически устойчив полимер. Преди употреба те бяха почиствани механично чрез полиране върху фина шкурка (графит) или полирани върху специални подложки, върху които се нанасят полиращи пасти (суспензии на Al_2O_3 с големина на частиците 1, 0,3 и 0,05 μm). Всяка стъпка на полиране е последвана от три-кратно почистване в дестилирана вода с ултразвук. Електрохимичното им модифициране с благородните метали Pd, Pt и Au беше извършено с потенциостатичен метод, като времето на отлагане беше варирано в интервала от 1 до 10 секунди. Металните фази се отлагат в потенциостатичен режим при E = - 155 mV Ag/AgCl от следните електролити: Pd от 5 mM $PdCl_2$ разтворен в 0.1 M HCl; Pt от 5 mM H_2PtCl_6 разтворен в 0.1 M HCl ; Au от 5 mM $HAuCl_4$ разтворен в 0.1 M HCl. Модифицирането се извършва в триелектродна конфигурация, състояща се от работен, сравнителен и спомагателен електроди. Токът протича между работния и спомагателния електроди, като катодът (работен електрод) изпълнява ролята на донор на електрони, а анодът (спомагателен електрод) – на акцептор. Йоните на метала, които са се получили при разтварянето на металните соли в електролитната баня, се движат насочено към катода, адсорбират се върху повърхността му и приемат от него електрон(и), като

електрохимично се редуцират до метални атоми. По този начин повърхността на катода се покрива с модифициращата фаза.

2. Електрохимично модифициране на въглеродни повърхности:

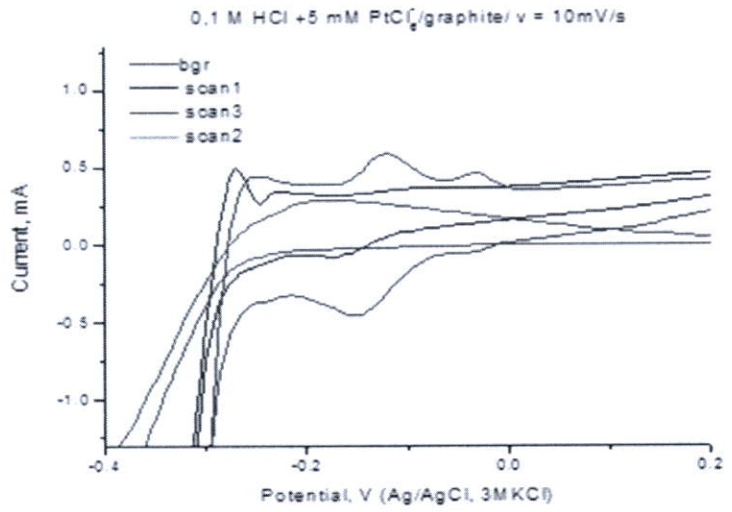
- Електрохимичното отлагането на Pd - наночастици върху графит е извършено с потенциостатична техника: кратковременна електролиза при постоянен потенциал от - 155mV спрямо Ag/AgCl, 3 M KCl.



Фиг.1. Циклични волтамперни криви, снети върху графитов електрод в присъствието на 5 mM Pd^{2+} в 0,1M HCl; сравнителен електрод Ag/AgCl, 3 M KCl; скорост на сканиране 10 mV/s.

За фонов ток е използвана 0,1M HCl, на цикличната волтамперна крива в червено се вижда, че не протичат процеси . При първото сканиране (синьо) с цикличната волтамперометрия редукцията на Pd започва при потенциал около 0mV. При следващите сканирания потенциалът на редукция на Pd върху графита не се изменя. В горната част на цикличните волтамперни криви се забеляза разлика в трите пика, с всяко следващо сканиране пикът се отмества към по – положителен потенциал. Това се дължи на адсорбцията на водородни йони, тъй като в неутрална среда не се наблюдава.

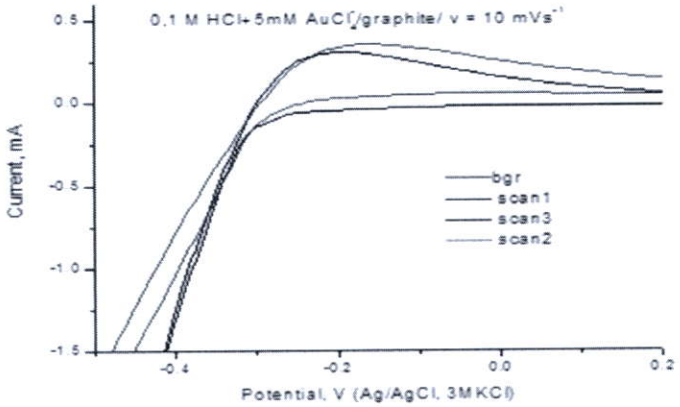
- Електрохимичното отлагането на Pt - наночастици върху графит е извършено с потенциостатична техника: кратковременна електролиза при постоянен потенциал от -155 mV спрямо Ag/AgCl, 3 M KCl,



Фиг.2. Циклични волтамперни криви, снети върху графитов електрод в присъствието на 5 mM Pt^{4+} в 0,1M HCl; сравнителен електрод Ag/AgCl, 3 M KCl; скорост на сканиране 10 mV/s.

При първото сканиране (синьо) с цикличната волтамперометрия редукцията на Pt започва при потенциал около -180mV. В горната част на цикличната волтамперна крива се вижда един пик, който показва, че протичат някакви процеси, но не са окисление или редукция. Третото сканиране (черно) показва, че редукцията на Pt се измества към по – положителен потенциал, и отложенията нарастват по брой и диаметър. Двата пика в горната част на трета волтамперна крива (черно) отразяват, че има разлика в свръхнапрежение на Pt.

- Електрохимичното отлагането на Au – наночастици върху графит е извършено с потенциостатична техника: кратковременна електролиза при постоянен потенциал от -155 mV спрямо Ag/AgCl, 3 M KCl. Този потенциал на поляризация на графита е с около 130-140 mV по – положителен от потенциала, при който започва редукцията на Au (-350mV) върху носителя.



Фиг.3. Циклични волтамперни криви, снети върху графитов електрод в присъствието на 5 mM Au^{3+} в 0,1M HCl; сравнителен електрод Ag/AgCl, 3 M KCl; скорост на сканиране 10 mV/s.

На цикличните волтамперни криви, макар да не се вижда протичането на процеси, се наблюдава образуване на златни клъстери. Електролизата е проведена за 1 и 3 секунди.

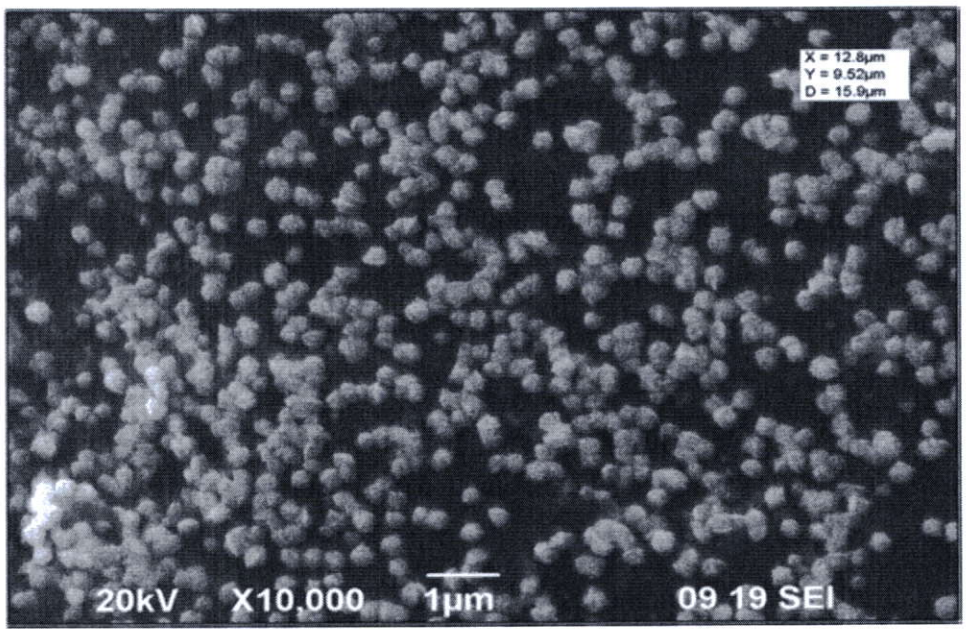
Разгледаната потенциостатична техника за получаване на наноструктури от благородни метали (Pd, Pt, Au) върху графит и стъкловъглерод е особено ценна при разработването на електрокатализатори, за които е необходимо да се осигури механична стабилност и добър електрически контакт между подложката и отложенията. Методът дава възможност да се варира с големината и разпределението на наноструктурите.

Отложените Au - наночастици могат да бъдат използвани като свързващи елементи за имобилизация на ензими върху електродни повърхности и разработване на биосензори за електрохимична детекция.

3. Микроскопско изследване на повърхностната морфология на модифициращите фази

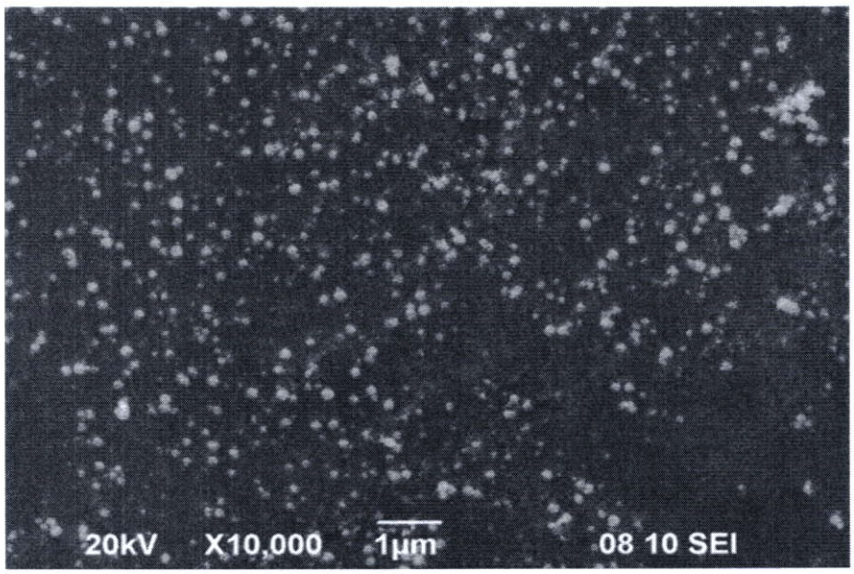
С цел идентифициране на морфологичните характеристики на получените модифицирани електродни повърхности беше проведено охарактеризиране с помощта на сканираща електронна микроскопия.

- Морфологията на Pd- отложения се характеризират със сферична форма със среден диаметър 300-400 nm като на места се наблюдават струпвания на наночастиците.



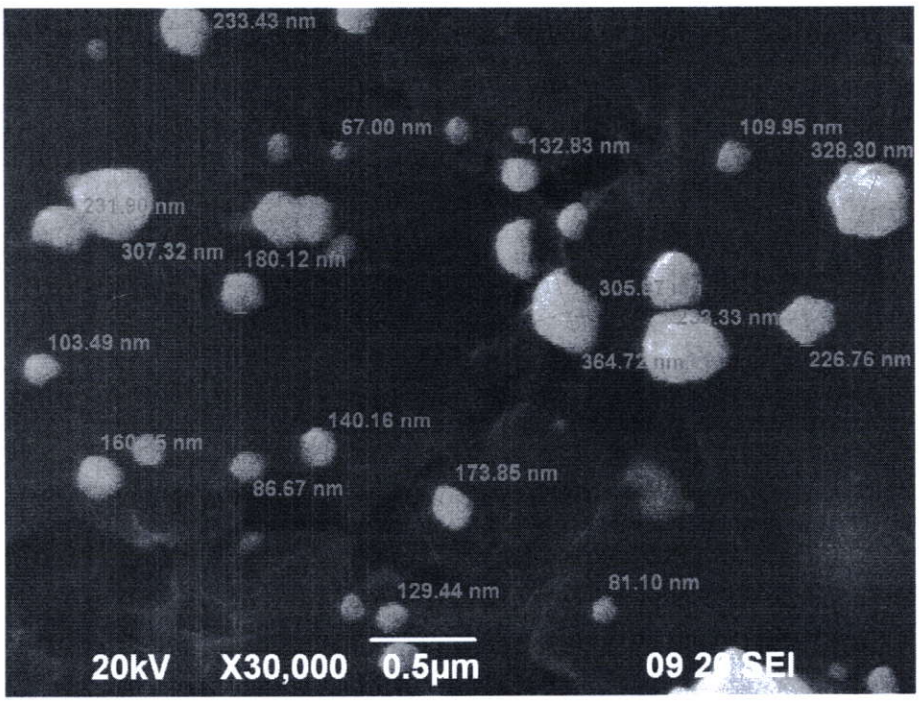
Фиг4.. Електронномикроскопско изображение на графит с отложение от Pd (среден диаметър на сферите 300 - 400 nm); Метод на отлагане: електролиза при постоянен потенциал -155mV (спрямо Ag/AgCl, 3M KCl). Увеличение 10 000 пъти.

- Морфологията на Pt – отложения се характеризира с не равномерно заселване на повърхността на графита. Размерите на частиците са със среден диаметър 100-150nm, т.е постигнато е нано-структурно модифициране на повърхността.



Фиг.5. Електронномикроскопска снимка на графит с отложение от Pt (среден диаметър на частиците 100 - 150 nm); Метод на отлагане: електролиза при постоянен потенциал -155mV (спрямо Ag/AgCl, 3M KCl). Увеличение 10 000 пъти.

- Морфологията на отложените Au – структури се характеризира с образуване на златни клъстери; с удължаване на времетраенето на електролизата отложенията нарастват до размер на частиците от 60-360 nm.



Фиг.6. Електронномикроскопска снимка на графит с отложение от Au (размер на частиците от 60-360 nm); Метод на отлагане: електролиза при постоянен потенциал -155mV (спрямо Ag/AgCl, 3 M KCl). Увеличение 30 000 пъти.

Влиянието върху размерите и разпределението на наночастиците върху носителя зависят от неговата повърхност. Графитът е порьозен материал и има относително висока електропроводимост и това обуславя образуване на малки струпвания предимно на места, които имат дефекти като ръбове, пори и други.

Експерименталната работа не е завършена в планирания обем, поради започването на ремонта на Химическия факултет на 01.07.2019 г.

IV. Участия в научни форуми:

Участие в Пета научна конференция за студенти, докторанти и млади учени „Предизвикателства в Химията“ проведена на 22 и 23 ноември 2019г. с постер :

М. Пимпилова, Н. Димчева, „Модифициране на електродни материали с Pd, Pt и Au“.

V. Други видове дейност:

Извън планираните в Индивидуалния ми учебен план задачи, по молба на научния ми ръководител, се включих в подготовката на проектно предложение, за текущата конкурсна сесия за финансиране на Фундаментални изследвания – 2019 г. към Националния фонд за научни изследвания.

Към настоящия момент участвам във финансираното проектно предложение (дог. с ФНИ № КП -06-Н39/8 „Хемо – ензимен катализ в неводна среда“), в следните работни пакети: (три от общо шест работни пакета):

- РП4 Модифициране на електродни повърхности с метални наночастици.
- РП3 Имобилизация на ензими върху електропроводящи повърхности.
- РП 5 Модифициране и охарактеризиране на биосензори.

29.02.2020 г.
гр. Пловдив

Докторант:……
(Мария Пимпилова)

Научен ръководител:……
(Доц.д-р Нина Димчева)

Ръководител катедра:……
(Доц.д-р Нина Димчева)

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Нина Димчева

относно извършената работа от редовен докторант Мария Генова Пимпилова по дисертационния ѝ труд на тема:"*Разработване и охарактеризиране на модифицирани електродни материали*" за първа година от докторантурата

За първата година от докторантурата (1.03.2019 – 1.03.2020) извършените дейности от редовен докторант Мария Г. Пимпилова, зачислена по научна специалност Физикохимия към катедра Физикохимия, са в в съответствие с поставените в индивидуалния план за обучение задачи, както следва:

I. Учебна и преподавателска дейност:

I.1. Докторантката е завършила успешно курс по факултативната дисциплина „Английски език за химици", както планувания за втората година от обучението ѝ курс по специализиращата дисциплина „Биокатализ и биоелектрохимия" (лекции и упражнения);

I.2. Положила е изпит по специалността (докторантски минимум) на 16.01.2020 г., с успех отличен 5.50.

I.3. М. Пимпилова е провела общо 50 ч. упражнения по Електрохимични методи за анализ със студенти, IV курс от специалности „Анализ и контрол" и „Медицинска химия".

II. Научно-изследователска работа по дисертационния труд:

II.1. Извършено е първоначално проучване на научната литература по проблематиката на дисертацията, използвайки базите данни - Scopus, Web of Science, и Google Scholar и е създадена библиотека от статии с помощта на специализирания библиографски софтуер Mendeley (свободна програма за организация на събраната информация), която периодично се актуализира.

II.2. Докторантката е усвоила и използва самостоятелно специализирана електрохимична апаратура с компютърно управление, както и софтуер за графично представяне и анализ на експериментални данни;

II.3. Докторантката е модифицирала графитови и стъкловъглеродни електродни повърхности с Au, Pt и Pd, което свидетелства, че е усвоила и прилага самостоятелно няколко различни електрохимични техники. С помощта на сканираща електронна микроскопия (СЕМ) е изследвана повърхностната морфология на получените образци.

Резултатите от експерименталната работа на докторант Пимпилова са обработени и оформени в една постерна презентация, представена на Пета научна конференция за

студенти, докторанти и млади учени „Предизвикателства в Химията“ проведена на 22 и 23 ноември 2019г. с постер : М. Пимпилова, Н. Димчева, „Модифициране на електродни материали с Pd, Pt и Au“. Експерименталната работа не е завършена в планирания обем, поради започването на ремонта на Химическия факултет на 01.07.2019 г.

Извън планираните в Индивидуалния учебен план на докторантката задачи, тя се включи в изготвянето на проектно предложение за конкурсна сесия на Националния фонд за научни изследвания за финансиране на Фундаментални изследвания – 2019 г. Към настоящия момент участва в научния екип на вече финансираното проектно предложение (дог. с ФНИ № КП -06-Н39/8: „Хемо – ензимен катализ в неводна среда“), с участие в три от общо шест работни пакета.

Въз основа на гореизложеното предлагам на членовете на катедрения съвет да дадат отлична оценка за работата на редовен докторант Мария Пимпилова за първата година от докторантурата ѝ.

04.03.2020 год. Научен ръководител:

Пловдив /доц. д-р Н. Димчева/

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

Д О К Л А Д

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 предложението на катедрения съвет :

- за приемане на годишния отчет на редовен докторант Петя Иванова Герасимова 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 Много добър 5.

Приложение:

1. Препис от протокол №186/10.03.2020 г.
2. Отчет на докторанта.
3. Преценка от научния ръководител, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, за изпълнение на учебния план през втората година на обучение.

10.03.2020 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 10.03.2020 г.

Протокол № 186

На 10.03.2020 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.

Състав на катедрения съвет 8.

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 и гл. ас. д-р Павел Янев. Отсъства 1: гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 2. Отчет на редовен докторант Петя Герасимова за изпълнение на индивидуалния план за втората година на обучение по докторска програма Методика на обучението по химия

област на висше образование 3. Педагогически науки

професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по...

Гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, научен ръководител на докторанта, представи на катедрения съвет отчета по изпълнение на индивидуалния план за втората година на обучение и становището си по изпълнение на учебния план и предложи то да бъде оценено с Много добър 5. Доц. Лекова подкрепи становището и предложената оценка.

След проведено гласуване, със 7 гласа „за“, катедраният съвет реши:

Приема отчета на докторант Петя Герасимова за изпълнение на индивидуалния план за втората година на обучение с оценка Много добър 5.

10.03.2020 г.
Пловдив

Протоколчик:
/Милена Славова/

Отчет за работата на Петя Иванова Герасимова –
Редовен докторант в катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“
За периода март, 2019 г. - февруари, 2020 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“.

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

Зачислена съм в редовна доктурантура на 01.03.2018 г.

Реализираните дейности по работния план за II. година са както следва:

I.Научноизследователска дейност през втората година от докторантската програма:

Научно-изследователската ми дейност през този период е свързана с проучване на изследванията в областта на природните науки, свързани с формиране и развитие на ключови компетентности и проучване на възможностите за осъществяване на експериментално изследване в различни по вид и профил образователни институции.

Съвмесно с научният ми ръководител гл. ас. д-р Йорданка Стефанова обсъдихме и анализирахме на резултатите от проведения предварителен педагогически експеримент. Резултатите докладвахме на 48-та Национална конференция на учителите по химия с международно участие „Актуални тенденции в химическото образование“, София, Факултет по химия и фармация на СУ "Св. Климент Охридски", 25-27. октомври 2019 г. Подготвихме статия, която предстои да бъде публикувана.

През този период разработихме методическа технология за развитие на ключови компетентности чрез обучението по Химия и опазване на околната среда 9. клас. В отчетния период стартирахме провеждането на формиращ експеримент, който ще приключи в края на учебната година. В съответствие с етапите за провеждане на педагогическо изследване подготвихме провеждането на заключителня експеримент.

II. Обучение по плана за II година:

През втората година от подготовката посещавах курс по Методология и методи напедагогическите изследвания и положих успешно изпит по дисциплината. През изтеклия период положих успешно изпит и по избираемата дисциплина Педагогика.

III. Педагогическа дейност по плана за II. година в този период не е осъществявана.

Подпис:……
(докторант Петя Герасимова)

Научен ръководител:……
(гл.ас. д-р Йорданка Стефанова)

27.02.2020г.
Гр.Пловдив

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

Докторант Петя Герасимова е 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 и 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 втората година от обучението съвместно с докторант Герасимова разработихме проект за провеждане на формиращ педагогически експеримент. В съответствие с него беше съставена методическа технология за развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет Химия и опазване на околната среда – 9 клас. През отчетният период докторантката стартира провеждането на формиращия експеримент, който ще приключи в края на учебната 2019 – 2020 година. На този етап са получени и емпирични данни и от провеждането му. Докторант Герасимова трябва да завърши запланувания експеримент и да насочи усилията към анализа на получените резултати.

Съвместно с докторант Герасимова анализирахме резултатите от провединя предварителен педагогически експеримент. Част от тях са докладвани на 48-та Национална конференция на учителите по химия с международно участие „Актуални тенденции в химическото образование“, София, Факултет по химия и фармация на СУ "Св. Климент Охридски", 25-27. октомври 2019 г. Подготвихме и първата статия по темата на изследването с участието на докторантката.

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

През втората година от обучението докторант Герасимова посети курсове по Методология и методи на педагогическите изследвания. Успешно положи изпити по Педагогика и Методология и методи на педагогическите изследвания.

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

5.03. 2020 год. Подпис:

гр. Пловдив гл.ас. д-р Стефанова

До Декана

На Химически факултет

при ПУ "П. Хилендарски"

ДОКЛАД

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

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание от 06.03.2020 г. КС на кат ФХ единодушно реши да бъде обявен конкурс за главен асистент по: област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, научна специалност Физикохимия, със срок от два месеца от датата на обнародването му в ДВ.

Мотивите за това предложение са следните:

1. Към настоящия момент катедрата се състои от 10 щатни служители: 8 преподаватели, от които един асистент по математика, един асистент по английски език, шестима преподаватели по физикохимия (4 хабилитирани и двама асистенти, от които единият на непълен щат) и двама химици. Преподавателите по математика и по английски език са обезпечени с пълен норматив за следващата учебна година.
2. За осигуряване на пълен норматив на 5,5 преподаватели от физикохимичното направление в катедрата, са необходими **1820** часа аудиторна заетост. Приблизителната оценка на броя часове за следващата 2020/21 академична година, в която не са включени избираемите дисциплини, предлагани от катедрата, показва че общият брой часове възлиза на **2107,5**, от които **1092,5** часа са семинарни занятия (95 ч.) и упражнения (997.5 ч.). Гореизложеното свидетелства, че са налице повече от необходимите 360 часа, които да обезпечат пълен годишен норматив за главен асистент. Прилагам приблизителна оценка на часовете за следващата учебна година, която ще се запази като тенденция и в следващите поне две- три години:

Часове – физикохимично направление в КФХ (5.5 преподаватели)	**Прогнозни часове 2020/21 уч. год. (без ИД)**
лекции	**1015**
семинари	**95**
упражнения	**997,5**
ОБЩО ЧАСОВЕ:	**2107,5**

Към настоящия доклад прилагам препис-извлечение от протокола на катедреното заседание, състояло се на 06.03.2020 год.

С уважение:

(доц. Н. Димчева)

13.02. 2020 год.

Препис- извлечение
от заседание на кат. Физикохимия

П Р О Т О К О Л № 4

Днес, 06.03.2020 г. в катедра Физикохимия се проведе Катедрен съвет.

Присъстват: доц. д-р Н. Димчева, проф. дхн В. Делчев, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Д. Петров, ас. П. Певичаров, ас. В. Колчева, М. Пимпилова, хим. М. Георгиева, хим. Н. Делчева.

Отсъства: Хр. Кръстева (в лекции).

Дневен ред:

1.Учебни въпроси

2.Кадрови въпроси

По т.1.1.....

По т.1.2.....

По т.1.3.....

По т.2.1.....

По т. 2.2.а).....

По т. 2.2.б) КС взе решение да се обяви конкурс за „ Главен асистент“ Област ВО: 4. Природни науки, математика и информатика; Професионално направление 4.2. Химически науки; Научна специалност: Физикохимия.

Гласували „ за“ решението – 7 членове на КС. Против – няма.

06.03.2020 г.

Протоколчик:
(М. Георгиева)

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 под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 05.05.2020 г., беше обсъдено осигуряването на учебните занятия за втори семестър. Във връзка с това бе предложено да се привлече хоноруван преподавател за провеждане на Практикум (0/0/60), включен в учебния план на бакалавърска специалност *Компютърна Химия* (IV-ти курс).

Катедреният съвет прие (12 гласа „за“) и предлага на Факултетния съвет да одобри ***д-р Нина Желязкова*** (Идеяконсулт ООД, гр. София) като хоноруван преподавател за провеждане на 30 часа практикум (30 часа упражнения) със студентите от специалност Компютърна Химия, IV-ти курс.

Прилагам препис-извлечение от катедрения съвет.

05.05.2020 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание
на катедра “Аналитична химия и КХ”,
от 05.05.2020г.

ПРОТОКОЛ № 5

На 05.05.2020 г. се състоя заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 13

В конферентната връзка участваха: 12

Не участвала гл. ас. д-р Е. Върбанова – в майчинство.

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.2. от дневния ред беше обсъдено осигуряването на учебните занятия за втори семестър. Във връзка с това бе предложено да се привлече хоноруван преподавател за провеждане на Практикум (0/0/60), включен в учебния план на бакалавърска специалност Компютърна Химия (IV-ти курс). След проведено обсъждане на заседанието бе единодушно гласувано (12 гласа “за”) и се прие **д-р Нина Желязкова** (Идеяконсулт ООД, гр. София) да проведе като хоноруван преподавател 30 часа практикум (30 часа упражнения) със студентите от специалност Компютърна Химия, IV-ти курс.

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да одобри представеното по-горе решение на КС на КАХКХ.

05.05.2020 Протоколчик:

/гл. ас. д-р С. Цонева/

До г-н Декана

на Химически факултет

при ПУ „Паисий Хилендарски“

ДОКЛАД

от доц. д-р Нина Димчева, ръководител на кат. Физикохимия, ХФ

Уважаеми г-н Декан,

На свое заседание от 06.03.2020 г. катедреният съвет към кат ФХ разгледа доклада от проф. дн В. Делчев, съгласуван с доц. д-р Д. Петров и физик Хр. Петров относно състоянието на Лабораторията по Рентгено-структурен анализ след ремонта на сградата на ХФ. В доклада са изложени 4 обективни причини, поради които съставът на ЛРСА се оттегля от заеманите длъжности.

Катедреният съвет към КФХ единодушно прие оставките на колегите и предлага ФС на ХФ да вземе решение за съдбата на рентгеновия апарат.

В случай, че апаратът бъде бракуван, а ЛРСА – разформирована, КС на кат. ФХ предлага помещението да бъде преобразувано в лаборатория по газова хроматография, която да се използва както за научно-изследователска дейност, така и за обучение на студенти в рамките на курсовете по „Хроматографски методи“ към кат. ОХ. Мотивите за това предложение са: да се използват рационално изградените вече газо-преносни системи за разположените в близост до помещението други хроматографски лаборатории.

Към настоящия доклад прилагам следните документи:

- доклад от проф. Делчев за текущото състояние на ЛРСА;
- препис-извлечение от Протокола на КС, състоял се на 06.03.2020 г.

13.03.2020 г.

гр. Пловдив

С уважение:

/доц. Н. Димчева/

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

гр. Пловдив, ул. "Цар Асен", № 24,
катедра Физикохимия

До Ръководителя
на кат. Физикохимия
при ПУ "П. Хилендарски"

ДОКЛАД

от проф. дхн Васил Борисов Делчев,
ръководител на Лабораторията по рентгеноструктурен анализ (ЛРСА),
ПУ „Паисий Хилендарски"

Госпожо Ръководител,

Моля да бъдат освободени от длъжностите, заемани в ЛРСА:

1. **проф. дхн Васил Борисов Делчев – ръководител ЛРСА**
2. **доц. д-р Димитър Николаев Петров – дозиметрист и отговорник по радиационна защита**
3. **физик Христо Танев Петров – механик на научна апаратура (от кат. Образователни технологии – Физико-технологичен факултет)**

Причините са следните:

1. При извършения ремонт в ХФ (юли – декември 2019), в това число в ЛРСА се установи липса на материали и апарати, с които се осигуряваше безопасната и нормална работа на рентгеновия дифрактометър TUR M 62. Кабелите, които свързват отделните блокове на дифрактометъра са брутално срязани и възстановяването им ще представлява трудност, решима само от технически лица, които се занимават с този вид научна апаратура.
2. Хронична липса на финансови средства за поддръжка на рентгеновия дифрактометър, който поради натрупаните години на експлоатация често излиза извън работен режим. За въвеждането му в такъв е необходима експертна помощ на техническо лице, на което следва да се заплати за положения труд. Често се налага закупуване на скъпоструващи резервни

части, които ние като лаборатория не можем да осигурим. Работата на «добра воля» от външни технически лица и «с подръчни средства» не доведе до устойчив работен режим рентгеновия дифрактометър.

3. Заниженият контрол на лабораторията (липса на камери и др.), стесняването на помещението на лабораторията, които са в противоречие с изискванията на службите, контролиращи тези лаборатории, а именно АЯР (Агенция за ядрено регулиране), РЗИ (Регионална здравна инспекция) - Пловдив и служба КОС (Контрол над общоопасните средства) на МВР – Пловдив.
4. Липса на финансови средства за обучение на персонала в специализиран курс, който се провежда на всеки пет години от ИЯИЯЕ (Институт за ядрени изследвания и ядрена енергетика - БАН, оторизиран от АЯР), срещу което се издава удостоверение, което позволява персоналът да работи с йонизиращи лъчения. Без този документ работата на ЛРСА е невъзможна.

Настоящият доклад е съгласуван с доц. д-р Д. Петров и физик Христо Петров, които дават съгласието си за отказ от заеманите длъжности към ЛРСА. Моля решението на КС и ФС да се сведе до знанието на г-н Ректора на ПУ, чиито заповеди за освобождаване от горепосочените длъжности ще трябва да приложим в писмо до АЯР.

04.03. 2020 г.
гр. Пловдив

С уважение:

Васил Борисов Делчев, дхн
професор по физикохимия и теоретична химия
Пловдивски университет, кат. Физикохимия
ул. Цар Асен № 24, 4000 – гр. Пловдив
Email: vdelchev@uni-plovdiv.net Тел: 0887 33 21 61

Препис- извлечение
от заседание на кат. Физикохимия

П Р О Т О К О Л № 4

Днес, 06.03.2020 г. в катедра Физикохимия се проведе Катедрен съвет.

Присъстват: доц. д-р Н. Димчева, проф. дхн В. Делчев, доц. д-р М. Стоянова, доц. д-р Д. Петров, ас. П. Певичаров, ас. В. Колчева, М. Пимпилова, хим. М. Георгиева, хим. Н. Делчева.

Отсъства: Хр. Кръстева (в лекции).

Дневен ред:
1.Учебни въпроси
2.Кадрови въпроси

По т.1.1.....

По т.1.2.....

По т.2.1. КС разгледа Доклада от проф. дхн В. Делчев, съгласуван с доц. д-р Д. Петров относно Рентгеновата лаборатория.

КС гласува единодушно Доклада за освобождаване на колегите от заеманите длъжности в Рентгеновата лаборатория и реши тя да се преобразува в лаборатория по Газова хроматография.

По т. 2.2.....

06.03.2020 г.

Протоколчик:
(М. Георгиева)