ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

ПРОГРАМА ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

за специалност ХИМИЯ за придобиване на образователно-квалификационна степен Бакалавър

I. СТРОЕЖ НА АТОМА

- Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на електронната обвивка на атома. Съвременни схващания за строежа на електронната обвивка на атома. Модел на Ръдърфорд-Бор за строежа на атома. Квантова теория на Бор. Развитие на теорията на Бор – принос на Зомерфелд.
- Вълнова механика. Принцип на неопределеността на Хайзенберг. Теория на дьо Бройл. Уравнение на Шрьодингер. Квантови числа. Атомни орбитали.
- Разпределение на електронната плътност. Разпределение на електроните в електронната обвивка на многоелектронните атоми – правила на Хунд и Клечковски. Принцип на Паули. Начини за изразяване на електронната конфигурация на атомите на химичните елементи. Основно и възбудено състояние на атомите на химичните елементи.
- Атомно ядро. Строеж на атомното ядро. Химичен елемент, масово число, изотопи, изобари и изотони.

II. ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА

- Периодичен закон на Менделеев и изградената на основата на периодичния закон периодична система на химичните елементи.
- Структура на периодичната система на химичните елементи. Връзка между структурата на периодичната система и строежа на електронната обвивка на атомите на химичните елементи. Периодичният закон от съвременно гледище строежа на атома.
- Периодично променящи се свойства на атомите на химичните елементи: йонизационна енергия, електронно сродство, атомни и йонни радиуси, електроотрицателност.

III. Природа на химичната връзка

- Предпоставки за развитието на съвременните теории за природа на химичната връзка – теории на Люис и Косел.
- Метод на валентните връзки (МВВ). Насищаемост на връзката и валентност. Насоченост на химичната връзката. Пространствена структура на молекулите. Молекули с кратни връзки. Нелокализирани химични връзки. Донорно-акцепторна връзка.
- Метод на молекулните орбитали (ММО). Порядък на връзката. Молекулни диаграми на хомоядрени и хетероядрени молекули. Магнитни и оптични свойства на молекулите. Сравнителна характеристика на МВВ и ММО.
- Междумолекулни сили на взаимодействие. Водородна връзка.

IV. Комплексни съединения

- Основни характеристики на комплексните съединения – координационно число, вътрешна и външна координационни сфери, централен атом, лиганди, степен на окисление на централен атом в координационна единица, хелатообразуване, дентатност на лиганди.
- Номенклатура на комплексните съединения. Примери за наименуване на комплексни съединения, съдържащи: един комплексен анион; един комплексен катион; комплексен катион и комплексен анион и на неутрални комплексни съединения.
- Изомерия при комплексните съединения.
- Природа на химичната връзка в комплексните съединения.
- Метод на валентните връзки (МВВ) – същност на метода. Високоспинови, външноорбитални и нискоспинови, вътрешноорбитални комплексни съединения.
- Теорията на кристалното поле (ТКП) – основно положение на теорията. Приложение на теорията при комплекси с координационно число 6 и 4 – силни и слаби полета. Спектрохимичен ред на лигандите. Магнитни свойства и цвят на комплексните съединения.
- Сравнителна характеристика на МВВ и ТКП.

V. ХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА СЪЕДИНЕНИЯ НА s-, p- и d-елементи

- s-елементи. Обща характеристика. Свойства на простите вещества и на химичните съединения. Методи за получаване.
- p-елементи. Обща характеристика. Свойства на простите вещества и на химичните съединения. Методи за получаване.
- d-елементи. Обща характеристика. Свойства на простите вещества и на химичните съединения. Методи за получаване.

VI. ХИМИЧНА ТЕРМОДИНАМИКА

- Първи принцип на термодинамиката. Вътрешна енергия. Енталпия. Топлина и работа.
- Втори принцип на термодинамиката. Ентропия. Изменението на ентропията – критерий за посоката на спонтанните процеси условията за установяване на термодинамично равновесие в изолирани системи.
- Термодинамични потенциали. Енергия на Гибс и енергия на Хелмхолц. Изменението на термодинамичните потенциали (ΔF и ΔG) – критерий за посоката на спонтанните процеси и условията за установяване на термодинамично равновесие в неизолирани системи. Химичен потенциал.
- Топлинни ефекти на химичните реакции. Закон на Хес и неговите следствия. Температурна зависимост на топлинния ефект на реакцията. Уравнения на Кирхоф.

VII. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ

- Закон за действие на масите – равновесна константа Кр, Кс и Кх при хомогенни и хетерогенни процеси.
- Влияние на концентрацията на реагиращите вещества, външното налягане и температурата върху равновесните системи.
- Реакционна изотерма, уравнения на реакционната изобара и на реакционната изохора.
- Термодинамика на фазовите превръщания от първи род. Уравнение на Клапейрон-Клаузиус – приложение. Основен закон на фазовите равновесия.

VIII. РАЗТВОРИ

- Обща характеристика на разтворите. Парциални молни величини. Уравнение на Гибс-Дюхем.
- Равновесие течен разтвор – наситени пари. Закон на Раул. Термодинамика на идеалните разтвори.
- Реални разтвори. Положителни и отрицателни отклонения от закона на Раул. Закон на Хенри.
- Колигативни свойства на разтворите. Температура на кипене и замръзване на разтвори на нелетливи вещества. Осмотично налягане.

IX. ХИМИЧНА КИНЕТИКА И ПОВЪРХНОСТНИ ЯВЛЕНИЯ

- Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък. Активираща енергия. Кинетика на простите реакции (нулев, първи и втори порядък).
- Катализа. Същност на каталитичното действие. Специфични особености на катализаторите и на каталитичните процеси. Активиране на хомогенно и хетерогенно каталитични процеси.
- Адсорбция върху твърда и течна повърхност. Величини, количествено характеризиращи адсорбцията. Адсорбционни изотерми на Лангмюир, Фройндлих и Брунауер-Емет-Телер (БЕТ).
- Повърхностно напрежение.Зависимост на повърхностното напрежение на течности и разтвори от температурата, концентрацията и природата на разтвореното вещество. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски. Адсорбционна изотерма на Гибс.

X. ЕЛЕКТРОХИМИЯ

- Разтвори на електролити. Електропроводимост на електролитни разтвори. Закони на Колрауш.
- Галваничен елемент. Електродвижещо напрежение (ЕДН) на галваничен елемент и връзката му с други величини. Термодинамика на галваничен елемент.
- Електроден потенциал. Уравнение на Нернст - приложение. Видове електроди – електроди от I-ви и II-ри род и редокселектроди.
- Електролизни процеси. Закони на Фарадей. Свръх напрежение.

XI. ВЪГЛЕВОДОРОДИ

- Строеж и реактивоспособност на въглеводородите. Структурна и стереоизомерия. Химични свойства: заместителни и присъединителни реакции - механизъм. CH-киселинни свойства при алкини. Окисление на въглеводородите. Методи за получаване на въглеводороди. Полимеризация.
- Ароматни въглеводороди - критерии за ароматност - правило на Хюкел. Механизъм на електрофилни заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране. Алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакции на електрофилно заместване.

XII. КИСЛОРОДСЪДЪРЖАЩИ ПРОИЗВОДНИ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИТЕ

- Структура и сравнителна реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Химични свойства: киселинно-основни свойства, реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.
- Алдехиди и кетони. Структура и реактивоспособност. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород, Гринярови реактиви и др. CH-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при α-C-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, Каницарова реакция и др. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване.

XIII. КАРБОКСИЛНИ КИСЕЛИНИ И ТЕХНИ ПРОИЗВОДНИ.

- Мастни и ароматни карбоксилни киселини. Структура и реактивоспособност. Киселинно-основни свойства. Реактивоспособност на карбоксилната група - механизъм на реакциите на ацилно нуклеофилно заместване за получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди. Реакции на декарбоксилиране. Реакции във въглеводородната верига. Методи за получаване.
- Функционални производни на карбоксилните киселини - киселинни халогениди и анхидриди, амиди и естери. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на карбоксилните киселини. Характерни химични свойства: хидролиза, преестерификация, Клайзенова кондензация, реакция на Кновенагел, реакция на Перкин.
- Дикарбоксилни киселини и техни производни. Представители. Изомерия. Свойства – дисоциация, декарбоксилиране, дехидратация. Реакции с естери на дикарбоксилните киселини - малонови синтези. Методи за получаване.
- Хидроксикарбоксилни и оксокарбоксилни киселини – представители, изомерия. Свойства – дехидратация, декарбоксилиране, ацетоцетови синтези. Методи за получаване.

XIV. ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ НА АЗОТА

- Амини - структура и реактивоспособност. Основност на алифатни и ароматни амини. Реакции на алкилиране и ацилиране. Образуване и химични свойства на диазониеви соли – реакции на диазотиране и купелуване (реакция на Зандмайер). Методи за получаване на амини.
- Аминокарбоксилни киселини-структура, изомерия. Химични свойства на аминокиселините. . Пептидна връзка. Строеж, свойства и получаване. Строеж и конформация на белтъчната молекула – видове връзки и сили на взаимодействие. Денатурация.

- Азотсъдържащи хетероциклени съединения - структура и химични свойства на пирол, индол, пиридин и хинолин. Алкалоиди.

XV. БИООРГАНИЧНА ХИМИЯ

- Въглехидрати - класификация и номенклатура. Монозахариди - структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: глюкоза, рибоза и фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърт. Аномери и епимери. Реакции за доказване на карбонилната група. Дизахариди. Начини на свързване на монозахаридните остатъци. Свойства. Представители. Полизахариди – видове и представители.
- Нуклеотиди и нуклеозиди – състав, строеж и номенклатура. Структура на ДНК. Структура на РНК. Видове РНК. Репликация и транскрипция. Генетичен код.

XVI. ТЕОРЕТИЧНИ ОСНОВИ И ПРИНЦИПИ НА КЛАСИЧЕСКИТЕ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ

- Киселинно-основни равновесия в аналитичната химия. Протолитна теория. Видове протолитни константи. Водороден експонент - pH. Сила на протолитите - фактори, от които зависи. Буферни разтвори. Влияние на разтворителя върху киселинно-основните равновесия.
- Протонометрия - принцип и класификация. Стандартни разтвори. Титрувални криви при определяне на силни и слаби протолити, влияние на свойствата и концентрацията на анализираното вещество върху профила на титрувалната крива. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие и критерии за избор на индикатор
- Комплексообразувателни процеси. Стабилност на комплексите и фактори, от които зависи. Влияние на странични реакции върху стабилността на комплексите, α - коефициенти и условни стабилитетни константи.
- Комплексометрично титруване. Влияние на pH върху стабилността на комплексите и определяне на оптимални условия за титруване. Криви на титруване - особености. Металохромни индикатори – принцип на действие и изисквания към индикаторите.
- Количествено характеризиране на процеси на утаяване и разтваряне - произведение на разтворимост и разтворимост. Фактори, влияещи върху разтворимостта на утайките. Условно произведение на разтворимост.
- Утаечно титруване. Изисквания към реакциите. Стандартни разтвори. Криви на титруване, влияние на условията за анализ върху профила на титрувалната крива. Видове индикатори.
- Окислително-редукционно титруване (Редоксиметрия). Обща характеристика и класификация. Изисквания към реакциите. Принцип на действие на редокс-индикаторите. Перманганометрия и йодометрия - стандартни разтвори, криви на титруване, особености и приложение.
- Инструментални титриметрични методи. Потенциометрично титруване - принцип, индикаторни и сравнителни електроди. Титрувални криви. Спектрофотометрично титруване - принцип, начини за определяне на еквивалентната точка. Предимства и ограничения на инструменталните методи за титруване.

XVII. ИНСТРУМЕНТАЛЕН АНАЛИЗ

- Електронни преходи в атомите и атомни спектри.
- Атомно-абсорбционен анализ – принцип на метода. Правила на Уолш, закон на Буге-Ламберт-Беер за светлинната абсорбция. Пламъков и електротермичен атомизатор. Пречения – спектрални и неспектрални. Аналитични характеристики.
- Емисионен спектрален анализ – източници на възбуждане. Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма – принцип, пречещи влияния (спектрални и неспектрални), аналитични характеристики.
- Масспектрометрия с индуктивно свързана плазма. Същност и приложение на метода. Пречещи влияния и начини за тяхното отстраняване или коригиране.
- Вибрационна спектроскопия. Принципи на инфрачервената и Рамановата спектроскопия – подборни правила, интензитет на ивиците.

- Вибрационен спектър на двуатомна и многоатомна молекула – видове и брой молекулни трептения. Характеристични трептения и фактори, влияещи върху тях.
- Електронна абсорбционна спектроскопия. Подборни правила, видове преходи, интензитет на ивиците.
- Спектроскопия на ядрения магнитен резонанс (ЯМР), физични основи. Химично отместване и спин-спиново взаимодействие в протонния ЯМР.
- Газова и течна хроматография. Принципи на качествен и количествен хроматографски анализ. Избор на хроматографски вариант.

XVIII. СТАТИСТИЧЕСКА ОБРАБОТКА НА ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ

- Представяне на резултати от измерване – средна стойност, стандартно отклонение, относително стандартно отклонение и доверителен интервал.
- Калибриране в количествения анализ – метод на външна калибрация, метод на стандартната добавка и метод на вътрешния стандарт.
- Неопределеност и метрологична проследимост на резултат от изпитване.
- Валидиране на изпитвателна процедура – чувствителност, работна област, граница на откриване и определяне.;

XIX. НЕОРГАНИЧНА ХИМИЧНА ТЕХНОЛОГИЯ И ЕКОЛОГИЧНА ХИМИЯ

- Сярна киселина. Суровини. Получаване на сярна киселина по контактния метод. Технология на свързания азот. Производство на амоняк. Пречистване на замърсени газове от аерозоли, газообразни и парообразни компоненти.
- Получаване на метали. Производство на цинк по хидрометалургичния метод и на мед по пирометалургичния метод. Пречистване на промишлени отпадъчни води: механични, физикохимични и химични методи.
- Класификация на силикатните изделия и материали. Производство на стъкло. Преработване на битови и промишлени твърди отпадъци.

XX. ОРГАНИЧНА ХИМИЧНА ТЕХНОЛОГИЯ И ВИСОКОМОЛЕКУЛНИ СЪЕДИНЕНИЯ

- Нефт. Физични методи за преработка - атмосферно-вакуумна дестилация. Химични методи за преработка – термичен и каталитичен крекинг. Пречистване (рафинация) на нефтопродуктите. Характеристика на горивата и смазочните масла и основни изисквания спрямо тях.
- Производство и преработка на хранителни продукти. Производство на захар – структура, суровини и получаване на захар.
- Производство и преработка на растителни и животински мазнини – чрез пресуване, чрез екстракция, добиване на животински мазнини, преработка на мазнините – рафинация, производство на хидрогенирани мазнини.
- Производство и преработка на технически продукти. Производство и преработка на целулоза – структура, суровини и методи за добиване на целулоза от дървесина.
- Поликондензация – определение, равновесна и неравновесна, основни зависимости при равновесната поликондензация. Полимеризация – видове, механизъм на радикаловата полимеризация.

ЛИТЕРАТУРА

1. Димитров А.,Неорганична химия I част, изд. ПУ, Пловдив, 1998.
2. Лазаров Д., Неорганична химия", Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2006.
3. Киркова Е., Химия на елементите и техните съединения, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2007
4. Лекова В., Гавазов К., Димитров А., Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия, изд. ПУ, Пловдив, 2008
5. Третьяков Ю. Д., Мартыненко Л. И., Григорьев А. Н., Цивадзе А. Ю., Неорганическая химия , Химия элементов, том 1 и том 2, Академкнига, Москва, 2007
6. Князев Д. А.,Смарыгин С.Н., Неорганическая химия, Юрайт, Москва, 2012.

7. Шрайвер Д., Эткинс П., Неорганическая химия том 2, Юрайт, Москва, 2010.
8. Ebbing Gammon, General Chemistry, Houghton Mifflin Company, Boston New York, 2009
9. Дамянов Д., Физикохимия I и II част, изд. СУБ Бургас, 1994 г.
10. P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry. Oxford, University Press, 2006
11. Моллов Н., Учебник по Органична химия, ПУ, 1993 г., 1996 г.
12. Петров Г., Органична химия, изд. СУ, 1996, 2006 г.
13. Бончев П., Увод в аналитичната химия, III изд. Наука и изкуства, София, 1985 г.
14. Борисова Р., Основи на химичния анализ, Водолей 2009
15. Пеков Г., Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Кл. Охридски", 2008 г.
16. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 2 тома, изд. Бином, Лаборатория знании, 2012
17. Андреев Г., Молекулна Спектроскопия, изд. ПУ, Пловдив, 2010 г.
18. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
19. Иванов Ст., Органична химична технология, Пловдив, изд. ПУ, 1993, 1998 г.
20. Хокинг М., Съвременни химически технологии и контрол на емисиите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2002 г.
21. Магаева Сн., Ст. Караиванов, Екологична химия и опазване на околната среда, Булвест 2000, София, 2002 г.
22. Панайотов Ив., Ст. Факиров, Химия и физика на полимерите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2005 г.
23. Лекционни материали по: Обща и Неорганична химия, Физикохимия, Органична химия, Биоорганична химия, Аналитична химия, Инструментални методи за анализ, Статистика и метрология в химията, Органична химична технология, Неорганична химична технология, Високомолекулни съединения, Екологична химия

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

ПРОГРАМА ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

за специалност МЕДИЦИНСКА ХИМИЯ за придобиване на образователно-квалификационна степен Бакалавър

I. СТРОЕЖ НА АТОМА

- Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на атома.
- Квантови числа и атомни орбитали. Принципи и правила за изграждане на електронна обвивка на атома. Начини за изразяване на електронната конфигурация на атомите на химичните елементи. Основно и възбудено състояние на атома.
- Съвременни теории за строежа на атома.
- Атомно ядро. Строеж на атомното ядро. Химичен елемент, масово число, изотопи, изобари и изотони.

II. ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА

- Периодична система на химичните елементи – структура на периодичната система. Класическа и съвременна формулировка на периодичния закон.
- Връзка между строежа на електронната обвивка на атомите на химичните елементи и мястото им в периодичната система.
- Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи. Изменение на химичния характер на елементите по групи и периоди.

III. КОМПЛЕКСНИ СЪЕДИНЕНИ

- Основни характеристики на комплексните съединения – координационно число, вътрешна и външна координационни сфери, централен атом, лиганди, степен на окисление на централен атом в координационна единица, хелатообразуване, дентатност на лиганди.
- Номенклатура на комплексните съединения. Примери за наименуване на комплексни съединения, съдържащи: един комплексен анион; един комплексен катион; комплексен катион и комплексен анион и на неутрални комплексни съединения.
- Изомерия при комплексните съединения.
- Природа на химичната връзка в комплексните съединения. Метод на валентните връзки (МВВ) – същност на метода. Високоспинови, външноорбитални и нискоспинови, вътрешноорбитални комплексни съединения. Теорията на кристалното поле (ТКП) – основно положение на теорията. Приложение на теорията при комплекси с координационно число 6 и 4 – силни и слаби полета. Спектрохимичен ред на лигандите. Магнитни свойства и цвят на комплексните съединения. Сравнителна характеристика на МВВ и ТКП.

IV. ХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА СЪЕДИНЕНИЯ НА s-, p- и d-елементи.

- s-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.
- p-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери
- d-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.

V. ХИМИЧНА ТЕРМОДИНАМИКА

- Принципи на термодинамиката (първиви и втори). Вътрешна енергия, енталпия, ентропия, енергия на Хелмхолц и енергия на Гибс.
- Изменението на ентропията (ΔS) – критерий за определяне посоката на процесите и установяване на термодинамично равновесие в изолирани системи.
- Изменение на термодинамичните потенциали (ΔF и ΔG) – критерии за определяне посоката и условията за равновесие на химичните процеси в неизолирани системи.
- Топлинни ефекти на химичните реакции. Закон на Хес и неговите следствия. Температурна зависимост на топлинния ефект на реакцията. Уравнения на Кирхоф.

VI. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ

- Закон за действие на масите – равновесна константа Кр, Кс и Кх при хомогенни и хетерогенни процеси.
- Влияние на различни фактори (концентрация на реагиращите вещества, външно налягане и температура) върху равновесните системи.
- Реакционна изотерма, уравнения на реакционната изобара и на реакционната изохора.

VII. ХИМИЧНА КИНЕТИКА И ПОВЪРХНОСТНИ ЯВЛЕНИЯ

- Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък.Активираща енергия. Кинетика на простите реакции (нулев, първи и втори порядък).
- Катализа: същност на каталитичното действие, хомогенна и хетерогенна катализа. Активиране на хомогенно и хетерогенно каталитични процеси. Ензимна катализа.
- Адсорбция върху твърда и течна повърхност. Величини, количествено характеризиращи адсорбцията – дефиниране и изчисляване. Адсорбционни изотерми на Лангмюир, Фройндлих и БЕТ.
- Повърхностно напрежение , зависимост на повърхностното напрежение на течности и разтвори от температурата, концентрацията и природата на разтвореното вещество. Адсорбционна изотерма на Гибс. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски.

VIII. ЕЛЕКТРОХИМИЯ

- Разтвори на електролити. Електропроводимост на електролитни разтвори (специфична (χ) и еквивалентна (λ) електропроводимост). Закони на Колрауш.
- Галваничен елемент. Електродвижещо напрежение (ЕДН) на галваничен елемент и връзката му с други величини. Термодинамика на галваничен елемент.
- Електроден потенциал. Уравнение на Нернст - приложение. Видове електроди – електроди от I-ви и II-ри род и редокселектроди.
- Електролизни процеси. Закони на Фарадей.

IX. ВЪГЛЕВОДОРОДИ

- Строеж и реактивоспособност на въглеводородите. Структурна и стереоизомерия. Химични свойства: заместителни и присъединителни реакции - механизъм. СН-киселинни свойства при алкини. Окисление на въглеводородите. Методи за получаване на въглеводороди. Полимеризация.
- Ароматни въглеводороди - критерии за ароматност - правило на Хюкел. Механизъм на електрофилни заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране. Алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакции на електрофилно заместване*.*

X. КИСЛОРОДСЪДЪРЖАЩИ ПРОИЗВОДНИ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИТЕ

- Структура и сравнителна реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Химични свойства: киселинно-основни свойства, реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.
- Алдехиди и кетони. Структура и реактивоспособност. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород, Гринярови реактиви и др. СН-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при α-С-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, Каницарова реакция и др. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване.
- Мастни и ароматни карбоксилни киселини. Структура и реактивоспособност. Киселинно-основни свойства. Реактивоспособност на карбоксилната група - механизъм на реакциите на ацилно нуклеофилно заместване за получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди. Реакции на декарбоксилиране. Реакции във въглеводородната верига. Методи за получаване.

- Функционални производни на карбоксилните киселини - киселинни халогениди и анхидриди, амиди и естери. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на карбоксилните киселини. Характерни химични свойства: хидролиза, преестерификация, Клайзенова кондензация, реакция на Кновенагел, реакция на Перкин. Методи за получаване.

XI. ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ НА АЗОТА

- Амини - структура и реактивоспособност. Основност на алифатни и ароматни амини. Реакции на алкилиране и ацилиране. Образуване и химични свойства на диазониеви соли – реакции на диазотиране и купелуване (реакция на Зандмайер). Методи за получаване на амини.
- Аминокарбоксилни киселини-структура, изомерия. Химични свойства на аминокиселините. . Пептидна връзка. Строеж, свойства и получаване. Строеж и конформация на белтъчната молекула – видове връзки и сили на взаимодействие. Денатурация.
- Азотсъдържащи хетероциклени съединения - структура и химични свойства на пирол, индол, пиридин и хинолин. Алкалоиди..

XII. БИООРГАНИЧНА ХИМИЯ

- Въглехидрати - класификация и номенклатура. Монозахариди - структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: глюкоза, рибоза и фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърт. Аномери и епимери. Реакции за доказване на карбонилната група. Дизахариди. Начини на свързване на монозахаридните остатъци. Свойства. Представители. Полизахариди – видове и представители.
- Нуклеотиди и нуклеозиди – състав, строеж и номенклатура. Структура на ДНК. Структура на РНК. Видове РНК. Репликация и транскрипция. Генетичен код.

XIII. ТЕОРЕТИЧНИ ОСНОВИ И ПРИНЦИПИ НА КЛАСИЧЕСКИТЕ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ

- Киселинно-основни равновесия в аналитичната химия. Протолитна теория. Видове протолитни константи. Водороден експонент - pH. Сила на протолитите - фактори, от които зависи. Буферни разтвори. Влияние на разтворителя върху киселинно-основните равновесия
- Протонометрия. Стандартни разтвори. Титрувални криви при определяне на силни и слаби протолити, влияние на свойствата и концентрацията на анализираното вещество върху профила на титрувалната крива. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие и критерии за избор на индикатор.
- Комплексообразувателни равновесия. Стабилност на комплексите и фактори, от които тя зависи. Видове стабилитетни константи: степенни и общи; термодинамични и концентрационни. Влияние на странични реакции върху стабилността на комплексите, α - коефициенти и условни константи. Количествен анализ – комплексонометрия. Титрувални криви и металохромни индикатори.
- Окислително-редукционно титруване (Редоксиметрия). Изисквания към реакциите. Влияние на концентрацията и свойствата на анализираното вещество и титранта върху еквивалентната част на титрувалната крива. Принцип на действие на редокс-индикаторите. Перманганометрия и йодометрия - стандартни разтвори, особености и приложение.

XIV. ИНСТРУМЕНТАЛЕН АНАЛИЗ

- Електронни преходи в атомите и атомни спектри.
- Атомно-абсорбционен анализ – принцип на метода. Закон на Буге-Ламберт-Беер за светлинната абсорбция. Пламъков и електротермичен атомизатор.
- Емисионен спектрален анализ – източници на възбуждане. Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма – принцип.
- Вибрационна спектроскопия. Принципи на инфрачервената и Рамановата спектроскопия. Характеристични трептения и фактори, влияещи върху тях.

- Електронна абсорбционна спектроскопия. Подборни правила, видове преходи, интензитет на ивиците.
- Спектроскопия на ядрения магнитен резонанс (ЯМР), физични основи. Химично отместване и спин-спиново взаимодействие в протонния ЯМР.

СПЕЦИАЛИЗИРАЩИ ДИСЦИПЛИНИ

XV. *Клинична химия*

- Стандартни изисквания за получаване и съхранение на биологични проби. Биологична вариация на клинично-лабораторните резултати – референтни граници.
- Калибриране на клинично-лабораторните методи – получаване на калибрационна права.
- Вътрешно-лабораторен качествен контрол – контролни карти.

XVI. *Анализ на лекарствени вещества*

- Контрол на качеството на лекарствените продукти – нормативни документи и контролни органи в Р. България;
- Подготовка на фармацевтичните проби за анализ – методи за предварително разделяне и/или концентриране (течно-течна екстракция, твърдофазна екстракция);
- Спектрален анализ на лекарствени вещества – приложение на инфрачервена спектроскопия, спектрофотометрия във видимата и ултравиолетовата област, атомна спектрометрия (пламъкова атомна емисия, пламъкова атомна абсорбция, оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма).
- Приложение на хроматографските методи при анализа на фармацевтични продукти-видове анализи. Особености на различните хроматографски техники. Видове течна хроматография- колони и детектори.
- Принципи на хроматографията с обратна фаза. Видове подвижни фази за BETX с обратна фаза. Влияние на pH на елуента. BETX на йонизиращи се органични съединения- определяне на аналгетици, антибиотици и витамини..

XVII. *Химия на лекарствените вещества*

- Лекарствени вещества, повлияващи нервната система:
  - ✓ Сънотворни лекарствени вещества.
  - ✓ Невролептици.
  - ✓ Анксиолитици.
- Химиотерапевтични средства:
  - ✓ Пеницилинови антибиотици. Природни и полусинтетични пеницилини.
  - ✓ Цефалоспорини.
  - ✓ Сулфонамиди антибактериални лекарствени вещества. Сулфонамидни лекарствени вещества с диуретично и антидиабетично действие.
- Болкоуспокояващи (аналгетични) и нестероидни противовъзпалителни средства:
  - ✓ Аналгетици с наркотично действие.
  - ✓ Неопиоидни аналгетици.
  - ✓ Нестероидни противовъзпалителни средства.
- Лекарствени средства влияещи на сърдечносъдовата система:
  - ✓ Лекарствени вещества подобряващи помпената функция на сърцето.
  - ✓ Вазодилататори.
  - ✓ Антиаритмични средства.

XVIII. Технология на лекарствените средства и материали за медицината

- Теоретични основи на процесите в технологиите на лекарствените средства. Разделяне на газови и течни нееднородни системи чрез гравитационно утаяване,

с използване на центробежни сили и електрично поле, филтруване, мокро очистване.

- Топлообменни процеси. Методи за нагряване – с димни газове, водна пара, междинни топлоносители, електрически ток. Кондензация и изпарение. Топлообменници – видове, устройство, принцип на действие.
- Масообменни (дифузионни) процеси. Теоретични основи и приложение на процесите абсорбция, адсорбция, екстракция, ректификация. Основни апарати, устройство и принцип на действие.
- Метали и сплави – класификация, свойства и приложение в медицината. Корозия и защита от корозия.
- Лекарствени вещества – количество и концентрации. Помощни вещества - предназначение и видове (повърхностно-активни вещества, високомолекулни съединения, вещества, коригиращи вкуса, оцветяващи помощни вещества). Стабилност на лекарствените продукти – физична, химична и микробиологична. Подходи за стабилизиране - видове антиоксиданти и консерванти. Тестове за оценка, доказване и проверка на стабилността
- Прахообразни лекарствени продукти - обща характеристика и класификация. Технология за приготвяне на прахове. Несъвместимост и нестабилност на праховете. Гранули – класификация и състав. Технология на гранулирането. Свойства на гранулите. Таблетки. Класификация, физикохимични характеристики и състав. Технология на получаване на необвити и обвити таблетки – апарати за таблетиране. Опаковане, съхранение и контрол. Капсули. Характеристики. Състав на капсулната стена. Методи за получаване. Твърди и меки желатинови капсули. Опаковане, съхранение и контрол.
- Течни лекарствени форми - характеристика и класификация. Носители (разтворители) за течни лекарствени форми. Разтвори на високомолекулни съединения. Сиропи. Характеристика и класификация. Технология на приготвянето на сиропите. Емулсии – характеристика, класификация, състав на фармацевтични емулсии. Физикохимична стабилност на емулсиите. Технология на приготвяне на емулсиите. Опаковка, съхранение и контрол на емулсиите.
- Фармацевтични аерозоли. Физикохимични характеристики, класификация и състав. Видове. Технология на приготвяне. Приложение. Опаковки, контрол и съхранение.
- Органични полимерни материали за медицината, фармацевтиката и стоматологията. Основни методи за получаване на полимери, синтез на по-важни полимери, самополимеризиращи, еластични и биоразградими полимерни материали.

ЛИТЕРАТУРА

1. Димитров А.,Неорганична химия I част, изд. ПУ, Пловдив, 1998.
2. Лазаров Д., Неорганична химия", Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2006.
3. Киркова Е., Химия на елементите и техните съединения, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2007
4. Лекова В., Гавазов К., Димитров А., Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия, изд. ПУ, Пловдив, 2008
5. Третьяков Ю. Д., Мартыненко Л. И., Григорьев А. Н., Цивадзе А. Ю., Неорганическая химия , Химия элементов, том 1 и том 2, Академкнига, Москва, 2007
6. Дамянов Д., Физикохимия I и II част, изд. СУБ Бургас, 1994 г.
7. P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry. Oxford, University Press, 2006
8. Моллов Н., Учебник по Органична химия, ПУ, 1993 г., 1996 г.
9. Петров Г., Органична химия, изд. СУ, 1996, 2006 г.

10. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
11. Иванов Ст., Органична химична технология, Пловдив, изд. ПУ, 1993, 1998 г.
12. Бончев П., Увод в аналитичната химия, III изд. Наука и изкуства, София, 1985 г.
13. Борисова Р., Основи на химичния анализ, Водолей 2009
14. Пеков Г., Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Кл. Охридски", 2008 г.
15. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 2 тома, изд. Бином, Лаборатория знании, 2012
16. Андреев Г., Молекулна Спектроскопия, изд. ПУ, Пловдив, 2010 г.
17. David G. Watson, Pharmaceutical Analysis: A Textbook for Pharmacy Students and Pharmaceutical Chemists, 3rd ed., Elsevier, 2012
18. Под редакцията на Т. Цветкова и Ст. Данев, Аналитични принципи и процедури в клиничната лаборатория. Апарати за измерване. Анализатори, Медицинско издателство ЕТ „Васил Петров“ ВАП – Пловдив, 2001
19. Scott W. P. R., Chrom-ed Book Series, Libraryforscience, 2003.
20. Dimov N., Chromatographic methods in the pharmaceutical analysis, NIHFI, 2005.
21. D. Watson, Pharmaceutical analysis, Churchill Livingstone, 2000.
22. Snyder R. Ll., J. J. Kirkland, J. W. Dolan, Introduction to modern liquid chromatography (електронно копие), John Wiley&Sons, Inc., Publication, 2010
23. Антонова А., Химия на лекарствата, Сиела, 2005;
24. Христов М., Лекарствени продукти, Екопрогрес, 2006;
25. Бижев А., Синтетични и полусинтетични лекарствени средства, ХТМУ София, 2003;
26. Vardanyan R.S. and Hurby V.J., Synthesis of Essential Drugs, Elsevier, 2006;
27. Johnson Douglas S, Li Jie Jack, The art of drug synthesis, John Wiley&Sons, Inc., 2007.
28. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
29. Боянов Б.,Процеси и апарати в химическата промишленост,ПУИ ”П. Хилендарски”, Пловдив,1998.
30. Д. Бучков, М. Кънев,Материалознание,Техника, София,2004
31. Рачев Д., Н. Ламбов, Фармацевтична технология, Летера, Пловдив, 2005
32. Минков Е., Р. Шекерджийски, Й. Лаковска, Технология на лекарствата, Медицина и физкултура, София, 1989 г.
33. Лекционни материали по: Основи на химията, Неорганична химия, Физикохимия, Органична химия, Биоорганична химия, Аналитична химия, Инструментален анализ, Химия на лекарствените вещества, Клинична химия, Анализ на лекарствени вещества, Технология на лекарствените средства, Материали за медицината.

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

ПРОГРАМА ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

за специалност ХИМИЯ С МАРКЕТИНГ за придобиване на образователно-квалификационна степен Бакалавър

I. СТРОЕЖ НА АТОМА

- Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на атома.
- Квантови числа и атомни орбитали. Принципи и правила за изграждане на електронна обвивка на атома. Начини за изразяване на електронната конфигурация на атомите на химичните елементи. Основно и възбудено състояние на атома.
- Съвременни теории за строежа на атома.
- Атомно ядро. Строеж на атомното ядро. Химичен елемент, масово число, изотопи, изобари и изотони.

II. ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА

- Периодична система на химичните елементи – структура на периодичната система. Класическа и съвременна формулировка на периодичния закон.
- Връзка между строежа на електронната обвивка на атомите на химичните елементи и мястото им в периодичната система.
- Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи. Изменение на химичния характер на елементите по групи и периоди.

III. ХИМИЧНИ РЕАКЦИИ

- Реакции, протичащи без промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи (неутрализационни, хидролизни, утаечни и др. реакции).
- Реакции, протичащи с промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи. Степен на окисление, окислител, редуктор, окисление и редукция. Видове окислително-редукционни реакции.
- Ред на относителната активност на металите (РОАМ). Взаимодействие на металите с разредени и концентрирани разтвори на солна, сярна и азотна киселини.

IV. ХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА СЪЕДИНЕНИЯ НА s-, p- и d-елементи.

- s-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.
- p-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери
- d-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.

V. ХИМИЧНА ТЕРМОДИНАМИКА

- Принципи на термодинамиката (първиви и втори). Вътрешна енергия, енталпия, ентропия, енергия на Хелмхолц и енергия на Гибс.
- Изменението на ентропията (ΔS) – критерий за определяне посоката на процесите и установяване на термодинамично равновесие в изолирани системи.
- Изменение на термодинамичните потенциали (ΔF и ΔG) – критерии за определяне посоката и условията за равновесие на химичните процеси в неизолирани системи.
- Топлинни ефекти на химичните реакции. Закон на Хес и неговите следствия. Температурна зависимост на топлинния ефект на реакцията. Уравнения на Кирхоф.

VI. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ

- Закон за действие на масите – равновесна константа Кр, Кс и Кх при хомогенни и хетерогенни процеси.
- Влияние на концентрацията на реагиращите вещества, външното налягане и температурата върху равновесните системи.
- Реакционна изотерма, уравнения на реакционната изобара и на реакционната изохора.

VII. ХИМИЧНА КИНЕТИКА И ПОВЪРХНОСТНИ ЯВЛЕНИЯ

- Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък.Активираща енергия. Кинетика на простите реакции (нулев, първи и втори порядък).
- Катализа: същност на каталитичното действие, хомогенна и хетерогенна катализа. Активиране на хомогенно и хетерогенно каталитични процеси.
- Адсорбция върху твърда и течна повърхност. Величини, количествено характеризиращи адсорбцията – дефиниране и изчисляване. Адсорбционни изотерми на Лангмюир, Фройндлих и БЕТ.
- Повърхностно напрежение , зависимост на повърхностното напрежение на течности и разтвори от температурата, концентрацията и природата на разтвореното вещество. Адсорбционна изотерма на Гибс. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски.

VIII. ЕЛЕКТРОХИМИЯ

- Разтвори на електролити. Електропроводимост на електролитни разтвори (специфична (χ) и еквивалентна (λ) електропроводимост). Закони на Колрауш.
- Галваничен елемент. Електродвижещо напрежение (ЕДН) на галваничен елемент и връзката му с други величини. Термодинамика на галваничен елемент.
- Електроден потенциал. Уравнение на Нернст - приложение. Видове електроди – електроди от I-ви и II-ри род и редокселектроди.
- Електролизни процеси. Закони на Фарадей.

IX. ВЪГЛЕВОДОРОДИ

- Строеж и реактивоспособност на въглеводородите. Структурна и стереоизомерия. Химични свойства: заместителни и присъединителни реакции - механизъм. СН-киселинни свойства при алкини. Окисление на въглеводородите. Методи за получаване на въглеводороди. Полимеризация.
- Ароматни въглеводороди - критерии за ароматност - правило на Хюкел. Механизъм на електрофилни заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране. Алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакции на електрофилно заместване**.**

X. КИСЛОРОДСЪДЪРЖАЩИ ПРОИЗВОДНИ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИТЕ

- Структура и сравнителна реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Химични свойства: киселинно-основни свойства, реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.
- Алдехиди и кетони. Структура и реактивоспособност. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород, Гринярови реактиви и др. СН-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при α-С-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, Каницарова реакция и др. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване.
- Мастни и ароматни карбоксилни киселини. Структура и реактивоспособност. Киселинно-основни свойства. Реактивоспособност на карбоксилната група - механизъм на реакциите на ацилно нуклеофилно заместване за получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди. Реакции на декарбоксилиране. Реакции във въглеводородната верига. Методи за получаване.
- Функционални производни на карбоксилните киселини - киселинни халогениди и анхидриди, амиди и естери. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на карбоксилните киселини. Характерни химични свойства: хидролиза, преестерификация, Клайзенова кондензация, реакция на Кновенагел, реакция на Перкин. Методи за получаване.

XI. ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ НА АЗОТА

- Амини - структура и реактивоспособност. Основност на алифатни и ароматни амини. Реакции на алкилиране и ацилиране. Образуване и химични свойства на диазониеви соли – реакции на диазотиране и купелуване (реакция на Зандмайер). Методи за получаване на амини.

XII. БИООРГАНИЧНА ХИМИЯ

- Въглехидрати - класификация и номенклатура. Монозахариди - структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: глюкоза, рибоза и фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърт. Аномери и епимери. Реакции за доказване на карбонилната група. Дизахариди. Начини на свързване на монозахаридните остатъци. Свойства. Представители. Полизахариди – видове и представители.

XIII. ТЕОРЕТИЧНИ ОСНОВИ И ПРИНЦИПИ НА КЛАСИЧЕСКИТЕ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ

- Киселинно-основни равновесия в аналитичната химия. Протолитна теория. Видове протолитни константи. Водороден експонент - pH. Сила на протолитите - фактори, от които зависи. Буферни разтвори.
- Протонометрия - принцип и класификация. Стандартни разтвори. Титрувални криви при определяне на силни и слаби протолити, влияние на свойствата и концентрацията на анализираното вещество върху профила на титрувалната крива. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие и критерии за избор на индикатор.
- Комплексообразувателни процеси. Стабилност на комплексите и фактори, от които зависи. Влияние на странични реакции върху стабилността на комплексите, α - коефициенти и условни стабилитетни константи. Количествен анализ – комплексонометрия. Титрувални криви и металохромни индикатори.
- Утаечно титруване. Принцип и изисквания към реакциите. Стандартни разтвори. Криви на титруване, влияние на условията за анализ върху профила на титрувалната крива. Видове индикатори.
- Окислително-редукционно титруване (Редоксиметрия). Обща характеристика и класификация. Изисквания към реакциите. Принцип на действие на редокс-индикаторите. Перманганометрия и йодометрия - стандартни разтвори, криви на титруване, особености и приложение

XIV. ИНСТРУМЕНТАЛЕН АНАЛИЗ

- Електронни преходи в атомите и атомни спектри.
- Атомно-абсорбционен анализ – принцип на метода. Закон на Буге-Ламберт-Беер за светлинната абсорбция. Пламъков и електротермичен атомизатор.
- Емисионен спектрален анализ – източници на възбуждане. Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма – принцип.
- Вибрационна спектроскопия. Принципи на инфрачервената и Рамановата спектроскопия – подборни правила, интензитет на ивиците.
- Вибрационен спектър на двуатомна и многоатомна молекула – видове и брой молекулни трептения. Характеристични трептения и фактори, влияещи върху тях.
- Електронна абсорбционна спектроскопия. Подборни правила, видове преходи, интензитет на ивиците.
- Спектроскопия на ядрения магнитен резонанс (ЯМР), физични основи. Химично отместване и спин-спиново взаимодействие в протонния ЯМР.

XV. СТАТИСТИЧЕСКА ОБРАБОТКА НА ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ

- Представяне на резултати от измерване – средна стойност, стандартно отклонение, относително стандартно отклонение и доверителен интервал;
- Калибриране в количествения анализ – метод на външна калибрация, метод на стандартната добавка и метод на вътрешния стандарт;
- Неопределеност и метрологична проследимост на резултат от изпитване;

XVI. ПРИЛОЖНА НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ЕКОЛОГИЯ И ОПАЗВАНЕ НА ОКОЛНАТА СРЕДА

- Сярна киселина. Суровини. Получаване на сярна киселина по контактния метод. Технология на свързания азот. Производство на амоняк. Пречистване на замърсени газове от аерозоли, газообразни и парообразни компоненти.
- Получаване на метали. Производство на цинк по хидрометалургичния метод и на мед по пирометалургичния метод. Пречистване на промишлени отпадъчни води: механични, физикохимични и химични методи.

XVII. ПРИЛОЖНА ОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ХИМИЯ НА ПОЛИМЕРИТЕ

- Нефт. Физични методи за преработка - атмосферно-вакуумна дестилация. Химични методи за преработка – термичен и каталитичен крекинг. Пречистване (рафинация) на нефтопродуктите. Характеристика на горивата и смазочните масла и основни изисквания спрямо тях.
- Производство и преработка на продукти от растителен произход. Производство на захар – структура, суровини и получаване на захар. Производство и преработка на целулоза – структура, суровини и методи за добиване от дървесина.
- Поликондензация – определение, равновесна и неравновесна, основни зависимости при равновесната поликондензация. Полимеризация – видове, механизъм на радикаловата полимеризация.

XVIII. МАРКЕТИНГ

- *УПРАВЛЕНСКИ РЕШЕНИЯ. Същност и видове управленски решения. Етапи в процеса на вземане и осъществяване на решението. Подходи и методи за вземане и осъществяване на решения: “Мозъчна атака”, “Хара гей”, “Дяволска адвокатура”.*
- *ОРГАНИЗАЦИОННО-УПРАВЛЕНСКИ СТРУКТУРИ. Елементи и параметри на организационно-управленските структури, организационно-структурни фактори. Сравнителен анализ на типовете организоционно-управленски структури: функционална, дивизионална и матрична.*
- *МАРКЕТИНГОВА СРЕДА – МИКРО- И МАКРОСРЕДА. Структура, елементи. Рискове, заплахи и възможности.*
- *МАРКЕТИНГОВИ ПРОУЧВАНИЯ. Същност, структура, видове, етапи на изследване. Маркетингова информация – видове, източници, методи и средства за събиране. Маркетингова информационна система (МИС).*
- *ПАЗАР. ВИДОВЕ ПАЗАРИ. Сегментиране и избор на целеви пазар, позициониране на продукта. Маркетингови стратегии, определени чрез матрица. Критерии за избор на сегмент. Показатели за определяне размера на пазарния сегмент.*
- *ПРОДУКТЪТ – ЕЛЕМЕНТ НА МАРКЕТИНГ МИКСА. Продукт. Продуктови стратегии. Усъвършенстване и създаване на нови продукти. Критерии, изисквания, рискове. Продуктов микс. Начини и средства за конкурентна диференциация на фирменото предлагане. Видове конкурентни предимства.*
- *ЦЕНАТА – ЕЛЕМЕНТ НА МАРКЕТИНГ-МИКСА. Цена. Ценообразуващи фактори, ценови стратегии, ценови микс. Видове цени.*
- *ПЛАСМЕНТЪТ – ЕЛЕМЕНТ НА МАРКЕТИНГ-МИКСА. Пласмент, пласментни стратегии, пласментен микс. Канали за пласмент, фактори при избора, системи за пласмент. Търговия на едро и на дребно – същност, средства и форми. Маркетинг логистика. Сервизна дейност.*
- *КОМУНИКАЦИЯТА – ЕЛЕМЕНТ НА МАРКЕТИНГ-МИКСА. Комуникация – същност, функции, равнища на комуникацията. Комуникационни канали – лични и нелични. Особености на комуникационния микс.*

ЛИТЕРАТУРА

1. Димитров А.,Неорганична химия I част, изд. ПУ, Пловдив, 1998.
2. Лазаров Д., Неорганична химия", Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2006.
3. Киркова Е., Химия на елементите и техните съединения, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2007
4. Лекова В., Гавазов К., Димитров А., Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия, изд. ПУ, Пловдив, 2008
5. Третьяков Ю. Д., Мартыненко Л. И., Григорьев А. Н., Цивадзе А. Ю., Неорганическая химия , Химия элементов, том 1 и том 2, Академкнига, Москва, 2007
6. Дамянов Д., Физикохимия I и II част, изд. СУБ Бургас, 1994 г.
7. P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry. Oxford, University Press, 2006
8. Моллов Н., Учебник по Органична химия, ПУ, 1993 г., 1996 г.
9. Петров Г., Органична химия, изд. СУ, 1996, 2006 г.
10. Бончев П., Увод в аналитичната химия, III изд. Наука и изкуства, София, 1985 г.
11. Борисова Р., Основи на химичния анализ, Водолей 2009
12. Пеков Г., Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Кл. Охридски", 2008 г.
13. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 2 тома, изд. Бином, Лаборатория знании, 2012
14. Андреев Г., Молекулна Спектроскопия, изд. ПУ, Пловдив, 2010 г.
15. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
16. Иванов Ст., Органична химична технология, Пловдив, изд. ПУ, 1993, 1998 г.
17. Хокинг М., Съвременни химически технологии и контрол на емисиите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2002 г.
18. Магаева Сн., Ст. Караиванов, Екологична химия и опазване на околната среда, Булвест 2000, София, 2002 г.
19. Панайотов Ив., Ст. Факиров, Химия и физика на полимерите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2005 г.
20. Иванов, Ив., Основи на менджмънта, изд. "Макрос", 2011 г.
21. Т. Димитрова, Маркетинг (понятия, задачи, казуси, тестове), УИ «П. Хилендарски», 2014 г
22. Лекционни материали по: Основи на химията, Неорганична химия, Физикохимия, Органична химия, Биоорганична химия, Аналитична химия, Инструментален анализ, Статистика и метрология в химията, Приложна органична химия, Приложна неорганична химия, Химия на полимерите, Екология и опазване на околната среда,

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

ПРОГРАМА ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

за специалност КОМПЮТЪРНА ХИМИЯ за придобиване на образователно-квалификационна степен Бакалавър

I. СТРОЕЖ НА АТОМА

- Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на атома.
- Квантови числа и атомни орбитали. Принципи и правила за изграждане на електронна обвивка на атома. Начини за изразяване на електронната конфигурация на атомите на химичните елементи. Основно и възбудено състояние на атома.
- Съвременни теории за строежа на атома.
- Атомно ядро. Строеж на атомното ядро. Химичен елемент, масово число, изотопи, изобари и изотони.

II. ПЕРИОДИЧЕН ЗАКОН И ПЕРИОДИЧНА СИСТЕМА

- Периодична система на химичните елементи – структура на периодичната система. Класическа и съвременна формулировка на периодичния закон.
- Връзка между строежа на електронната обвивка на атомите на химичните елементи и мястото им в периодичната система.
- Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи. Изменение на химичния характер на елементите по групи и периоди.

III. ХИМИЧНИ РЕАКЦИИ

- Реакции, протичащи без промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи (неутрализационни, хидролизни, утаечни и др. реакции).
- Реакции, протичащи с промяна степента на окисление на атомите на химичните елементи. Степен на окисление, окислител, редуктор, окисление и редукция. Видове окислително-редукционни реакции.
- Ред на относителната активност на металите (РОАМ). Взаимодействие на металите с разредени и концентрирани разтвори на солна, сярна и азотна киселини.

IV. ХИМИЧНИ СВОЙСТВА НА СЪЕДИНЕНИЯ НА s-, p- и d-елементи.

- s-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.
- p-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери
- d-елементи. Обща характеристика, свойства. Изменение на химичния характер на съединенията им. Примери.

V. ХИМИЧНА ТЕРМОДИНАМИКА

- Принципи на термодинамиката (първиви и втори). Вътрешна енергия, енталпия, ентропия, енергия на Хелмхолц и енергия на Гибс.
- Изменението на ентропията (ΔS) – критерий за определяне посоката на процесите и установяване на термодинамично равновесие в изолирани системи.
- Изменение на термодинамичните потенциали (ΔF и ΔG) – критерии за определяне посоката и условията за равновесие на химичните процеси в неизолирани системи.
- Топлинни ефекти на химичните реакции. Закон на Хес и неговите следствия. Температурна зависимост на топлинния ефект на реакцията. Уравнения на Кирхоф.

VI. ХИМИЧНО РАВНОВЕСИЕ

- Закон за действие на масите – равновесна константа Кр, Кс и Кх при хомогенни и хетерогенни процеси.
- Влияние на концентрацията на реагиращите вещества, външното налягане и температурата върху равновесните системи.
- Реакционна изотерма, уравнения на реакционната изобара и на реакционната изохора.

VII. ХИМИЧНА КИНЕТИКА И ПОВЪРХНОСТНИ ЯВЛЕНИЯ

- Скорост на химичните реакции. Молекулност и порядък.Активираща енергия. Кинетика на простите реакции (нулев, първи и втори порядък).
- Катализа: същност на каталитичното действие, хомогенна и хетерогенна катализа. Активиране на хомогенно и хетерогенно каталитични процеси.
- Адсорбция върху твърда и течна повърхност. Величини, количествено характеризиращи адсорбцията – дефиниране и изчисляване. Адсорбционни изотерми на Лангмюир, Фройндлих и БЕТ.
- Повърхностно напрежение , зависимост на повърхностното напрежение на течности и разтвори от температурата, концентрацията и природата на разтвореното вещество. Адсорбционна изотерма на Гибс. Повърхностно активни вещества. Уравнение на Шишковски.

VIII. ЕЛЕКТРОХИМИЯ

- Разтвори на електролити. Електропроводимост на електролитни разтвори (специфична (χ) и еквивалентна (λ) електропроводимост). Закони на Колрауш.
- Галваничен елемент. Електродвижещо напрежение (ЕДН) на галваничен елемент и връзката му с други величини. Термодинамика на галваничен елемент.
- Електроден потенциал. Уравнение на Нернст - приложение. Видове електроди – електроди от I-ви и II-ри род и редокселектроди.
- Електролизни процеси. Закони на Фарадей.

IX. ВЪГЛЕВОДОРОДИ

- Строеж и реактивоспособност на въглеводородите. Структурна и стереоизомерия. Химични свойства: заместителни и присъединителни реакции - механизъм. СН-киселинни свойства при алкини. Окисление на въглеводородите. Методи за получаване на въглеводороди. Полимеризация.
- Ароматни въглеводороди - критерии за ароматност - правило на Хюкел. Механизъм на електрофилни заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране. Алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс. Ориентиращ ефект на заместителите при реакции на електрофилно заместване**.**

X. КИСЛОРОДСЪДЪРЖАЩИ ПРОИЗВОДНИ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИТЕ

- Структура и сравнителна реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Химични свойства: киселинно-основни свойства, реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.
- Алдехиди и кетони. Структура и реактивоспособност. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород, Гринярови реактиви и др. СН-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при α-С-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, Каницарова реакция и др. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване.
- Мастни и ароматни карбоксилни киселини. Структура и реактивоспособност. Киселинно-основни свойства. Реактивоспособност на карбоксилната група - механизъм на реакциите на ацилно нуклеофилно заместване за получаване на киселинни халогениди, анхидриди, естери, амиди. Реакции на декарбоксилиране. Реакции във въглеводородната верига. Методи за получаване.
- Функционални производни на карбоксилните киселини - киселинни халогениди и анхидриди, амиди и естери. Сравнение на реакционната способност на функционалните производни на карбоксилните киселини. Характерни химични свойства: хидролиза, преестерификация, Клайзенова кондензация, реакция на Кновенагел, реакция на Перкин. Методи за получаване.

XI. ОРГАНИЧНИ СЪЕДИНЕНИЯ НА АЗОТА

- Амини - структура и реактивоспособност. Основност на алифатни и ароматни амини. Реакции на алкилиране и ацилиране. Образуване и химични свойства на диазониеви соли – реакции на диазотиране и купелуване (реакция на Зандмайер). Методи за получаване на амини.

XII. БИООРГАНИЧНА ХИМИЯ

- Въглехидрати - класификация и номенклатура. Монозахариди - структура и стереоизомерия. Циклична структура на монозахаридите: глюкоза, рибоза и фруктоза – образуване на полуацетали. Формули на Хауърт. Аномери и епимери. Реакции за доказване на карбонилната група. Дизахариди. Начини на свързване на монозахаридните остатъци. Свойства. Представители. Полизахариди – видове и представители.

XIII. ТЕОРЕТИЧНИ ОСНОВИ И ПРИНЦИПИ НА КЛАСИЧЕСКИТЕ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ

- Киселинно-основни равновесия в аналитичната химия. Протолитна теория. Видове протолитни константи. Водороден експонент - pH. Сила на протолитите - фактори, от които зависи. Буферни разтвори.
- Протонометрия - принцип и класификация. Стандартни разтвори. Титрувални криви при определяне на силни и слаби протолити, влияние на свойствата и концентрацията на анализираното вещество върху профила на титрувалната крива. Киселинно-основни индикатори – принцип на действие и критерии за избор на индикатор.
- Комплексообразувателни процеси. Стабилност на комплексите и фактори, от които зависи. Влияние на странични реакции върху стабилността на комплексите, α - коефициенти и условни стабилитетни константи. Количествен анализ – комплексонометрия. Титрувални криви и металохромни индикатори.
- Утаечно титруване. Принцип и изисквания към реакциите. Стандартни разтвори. Криви на титруване, влияние на условията за анализ върху профила на титрувалната крива. Видове индикатори.
- Окислително-редукционно титруване (Редоксиметрия). Обща характеристика и класификация. Изисквания към реакциите. Принцип на действие на редокс-индикаторите. Перманганометрия и йодометрия - стандартни разтвори, криви на титруване, особености и приложение

XIV. ИНСТРУМЕНТАЛЕН АНАЛИЗ

- Електронни преходи в атомите и атомни спектри.
- Атомно-абсорбционен анализ – принцип на метода. Закон на Буге-Ламберт-Беер за светлинната абсорбция. Пламъков и електротермичен атомизатор.
- Емисионен спектрален анализ – източници на възбуждане. Оптико емисионен анализ с индуктивно свързана плазма – принцип.
- Вибрационна спектроскопия. Принципи на инфрачервената и Рамановата спектроскопия – подборни правила, интензитет на ивиците.
- Вибрационен спектър на двуатомна и многоатомна молекула – видове и брой молекулни трептения. Характеристични трептения и фактори, влияещи върху тях.
- Електронна абсорбционна спектроскопия. Подборни правила, видове преходи, интензитет на ивиците.
- Спектроскопия на ядрения магнитен резонанс (ЯМР), физични основи. Химично отместване и спин-спиново взаимодействие в протонния ЯМР.

XV. СТАТИСТИЧЕСКА ОБРАБОТКА НА ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ

- Представяне на резултати от измерване – средна стойност, стандартно отклонение, относително стандартно отклонение и доверителен интервал;
- Калибриране в количествения анализ – метод на външна калибрация, метод на стандартната добавка и метод на вътрешния стандарт;
- Неопределеност и метрологична проследимост на резултат от изпитване;

XVI. ПРИЛОЖНА НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ЕКОЛОГИЯ И ОПАЗВАНЕ НА ОКОЛНАТА СРЕДА

- Сярна киселина. Суровини. Получаване на сярна киселина по контактния метод. Технология на свързания азот. Производство на амоняк. Пречистване на замърсени газове от аерозоли, газообразни и парообразни компоненти.
- Получаване на метали. Производство на цинк по хидрометалургичния метод и на мед по пирометалургичния метод. Пречистване на промишлени отпадъчни води: механични, физикохимични и химични методи.

XVII. ПРИЛОЖНА ОРГАНИЧНА ХИМИЯ И ХИМИЯ НА ПОЛИМЕРИТЕ

- Нефт. Физични методи за преработка - атмосферно-вакуумна дестилация. Химични методи за преработка – термичен и каталитичен крекинг. Пречистване (рафинация) на нефтопродуктите. Характеристика на горивата и смазочните масла и основни изисквания спрямо тях.
- Производство и преработка на продукти от растителен произход. Производство на захар – структура, суровини и получаване на захар. Производство и преработка на целулоза – структура, суровини и методи за добиване от дървесина.
- Поликондензация – определение, равновесна и неравновесна, основни зависимости при равновесната поликондензация. Полимеризация – видове, механизъм на радикаловата полимеризация.

СПЕЦИАЛИЗИРАЩИ ДИСЦИПЛИНИ

XVIII. Компютърни операционни системи

- Основни функции на операционната система. Конзола и терминал. Операционна система Windows. Работа с файлове.
- Текстообработка. Елекронни таблици.

XIX. Обектно-ориентирано програмиране с JAVA

- Основни елементи на езика JAVA. Променливи, изрази и специални символи. Виртуална машина, компилиране, помощни програми: javac и java.
- Обектно-ориентирано програмиране. Класове в JAVA. Конструктори и деструктори. Атрибути за достъп до полета и методи. Наследяване.

XX. Подходи за компютърно представяне на структурна информация

- Топологично представяне - таблица на свързаност. Линейни нотации SMILES и SMARTS. Двумерно представяне. Тримерно структурно представяне. Декартови координати и вътрешни координати. Z-матрица. Молекулни повърхнини.
- Молекулни дескриптори за компютърно моделиране в химията. Класификация на дескрипторите. Матрични представяния: матрица на съседство, матрица на топологичните разстояния, матрица на Лаплас. Топологични индекси. Индекси на Уинер, Загреб, Балабан, Рандич (индекси на свързаност). Геометрични дескриптори. 3D индекс на свързаност и 3D индекс на Уинер. Геометрична атомна ексцентричност, радиус и диаметър на молекула. Индекс на овалност.

XXI. Компютърно моделиране в химията

- Метод на молекулната механика. Дефиниция за силово поле. Повърхнина на Борн-Опенхаймер. Валентно силово поле. Енергетични членове на стеричната енергия. Параметризация на силово поле. Методи за минимизация на енергията. Конформации и конформери. Конформационен анализ.
- Линейна регресия с много променливи. Метод на най-малките квадрати. Полиномиални модели. Статистическо охарактеризиране на коефициентите. Нелинейна регресия.

- QSAR моделиране. Корелации между структура, свойство и активност на съединението. Уравнения на Хамет. Линейни модели на свободната енергия. Анализ на Ханч. Нелинейни QSAR модели. 3D QSAR моделиране - метод CoMFA.
- Компютърно моделиране чрез адитивни схеми. Атомни адитивни схеми (схеми от нулев ред). Адитивни схеми от първи ред. Адитивни схеми от втори ред. Коефициент на разпределение LogP. Моделиране на LogP.
- Химиметрични методи. Класификация по разстояния до центроидите на извадките.
- Метод на кластерния анализ: класификация по единична и пълна връзка.
- Метод на к-най-близки съседи.
- Теория на пертурбациите в изчислителната химия – основни положения. Видове пертурбации при спрегнати системи. Адитивност на пертурбациите от първи и втори род.

ЛИТЕРАТУРА

1. Димитров А.,Неорганична химия I част, изд. ПУ, Пловдив, 1998.
2. Лазаров Д., Неорганична химия", Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2006.
3. Киркова Е., Химия на елементите и техните съединения, Университетско издателство «Св. Климент Охридски», София, С. 2007
4. Лекова В., Гавазов К., Димитров А., Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия, изд. ПУ, Пловдив, 2008
5. Третьяков Ю. Д., Мартыненко Л. И., Григорьев А. Н., Цивадзе А. Ю., Неорганическая химия , Химия элементов, том 1 и том 2, Академкнига, Москва, 2007
6. Дамянов Д., Физикохимия I и II част, изд. СУБ Бургас, 1994 г.
7. P. Atkins, J. de Paula: Atkins' Physical Chemistry. Oxford, University Press, 2006
8. Моллов Н., Учебник по Органична химия, ПУ, 1993 г., 1996 г.
9. Петров Г., Органична химия, изд. СУ, 1996, 2006 г.
10. Бончев П., Увод в аналитичната химия, III изд. Наука и изкуства, София, 1985 г.
11. Борисова Р., Основи на химичния анализ, Водолей 2009
12. Пеков Г., Аналитична химия. Равновесия в разтвор, УИ „Св. Кл. Охридски", 2008 г.
13. Г. Кристиан, Аналитическая химия, 2 тома, изд. Бином, Лаборатория знании, 2012
14. Андреев Г., Молекулна Спектроскопия, изд. ПУ, Пловдив, 2010 г.
15. Димитров Р., Б. Боянов Неорганична химична технология, изд. ПУ, Пловдив, 2001 г.
16. Иванов Ст., Органична химична технология, Пловдив, изд. ПУ, 1993, 1998 г.
17. Хокинг М., Съвременни химически технологии и контрол на емисиите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2002 г.
18. Магаева Сн., Ст. Караиванов, Екологична химия и опазване на околната среда, Булвест 2000, София, 2002 г.
19. Панайотов Ив., Ст. Факиров, Химия и физика на полимерите, УИ „Св. Кл. Охридски", София, 2005 г.
20. Gasteiger J., Engel T. Chemoinformatics a textbook. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2003 г.
21. Симеонов В. Принципи на обработка на химичните данни. изд. СУ, София, 2000 г.
22. Massart D., Vandenginste B., Deming S., Michotte Y., Kaufman L. Chemometrics: a textbook. Elsevier, 1988.
23. Екел Б. Да мислим на Java. СофтПрес 2001г.
24. Пол МакФедрис, Моят Office 2016, ЗеСТ Прес, 2017
25. Уолъс Уонг, Microsoft Office 2013 For Dummie, АлексСофт, 2014
26. A. Leach, V. Gillet, An Introduction To Chemoinformatics, Springer, 2007
27. Лекционни материали по: Основи на химията, Неорганична химия, Физикохимия, Органична химия, Биоорганична химия, Аналитична химия, Инструментален анализ, Статистика и метрология в химията, Приложна органична химия, Приложна неорганична химия, Химия на полимерите, Екология и опазване на околната среда и по всички специализиращи курсове

ПРЕДЛОЖЕНИЕ
за Държавни изпитни комисии
за ОКС „бакалавър”

I. Специалност “Химия” - редовно и задочно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 26 юли и 27 септември 2018 год.

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

1. Проф. дхн Васил Делчев
2. Доц. д-р Петя Маринова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
5. Доц. д-р Георги Патронов

II. Специалност “Медицинска химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 24 юли и 25 септември 2018 год.

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

1. Проф. д-р Гинка Антова
2. Доц. д-р Ваня Лекова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
5. Доц. д-р Солея Даньо
6. Доц. д-р Нина Димчева
7. Доц. д-р Георги Патронов

III. Специалност “Компютърна химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 25 юли и 26 септември 2018 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Виолета Стефанова
Членове:

1. Проф. дхн Пламен Пенчев
2. Проф. д-р Гинка Антова
3. Доц. д-р Ваня Лекова
4. Доц. д-р Стоянка Атанасова
5. Доц. д-р Солея Даньо
6. Доц. д-р Мария Стоянова
7. Доц. д-р Георги Патронов
8. Доц. д-р Николай Кочев

IV. Специалност “Химия с маркетинг” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 25 юли и 26 септември 2018 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Виолета Стефанова
Членове:

1. Проф. дхн Пламен Пенчев
2. Проф. д-р Гинка Антова
3. Доц. д-р Ваня Лекова
4. Доц. д-р Стоянка Атанасова
5. Доц. д-р Солея Даньо
6. Доц. д-р Мария Стоянова
7. Доц. д-р Георги Патронов
8. Доц. д-р Теофана Димитрова

V. Специалност "Анализ и контрол" - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 25 юли и 26 септември 2018 год.

КОМИСИЯ:
Председател: Доц. д-р Виолета Стефанова
Членове:

1. Проф. дхн Пламен Пенчев
2. Проф. д-р Гинка Антова
3. Доц. д-р Ваня Лекова
4. Доц. д-р Стоянка Атанасова
5. Доц. д-р Солея Даньо
6. Доц. д-р Мария Стоянова
7. 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 - 26 юли и 27 септември 2018 год.

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

1. Проф. дхн Васил Делчев
2. Доц. д-р Петя Маринова
3. Доц. д-р Кирил Симитчиев
4. Доц. д-р Румяна Бакалска
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 26 юли и 27 септември 2018 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

II. Специалност „Хранителна химия” – редовно и задочно обучение на 25 юли, 26 септември 2018 год.

Председател: Доц. д-р Веселин Йорданов Кметов

Членове:

1. Проф. д-р Гинка Атанасова Антова
2. Проф. д-р Магдален Димитров Златанов
3. Гл. ас. д-р Жана Юлиянова Петкова

III. Специалност „Химия и екология” – задочно обучение на 26 юли и 27 септември 2018 год.

Председател: Доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова

Членове:

1. Доц. д-р Георги Иванов Патронов
2. Доц. д-р Боян Симеонов Боянов
3. Доц. д-р Агоп Киркор Сренц
4. Доц. д-р Диана Атанасова Кирин

IV. Специалност „Медицинска химия” – редовно и задочно обучение на 20 април 2018 (за приетите през март), 16 юни и 25 септември 2018 год.

Председател: Доц. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:

1. Доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов
2. Доц. д-р Солея Запрянова Даньо
3. Д-р Валентина Борисова Ангелова

Предложение

за комисия за провеждане на държавен изпит за допълнителна професионална квалификация „Учител по химия” на 27. 07. 2018 год. и 28. 09. 2018 год., в състав:

Председател: Доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова

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 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 учебни програми за дисциплината Основи на химията за специалности:

1. Инженерна физика, задочно обучение и Екоенергийни технологии, редовно обучение с хорариуми 30/0/30 и
2. Инженерна физика, редовно обучение с хорариум 30/0/45

Учебните програми бяха обсъдени и приети на катедрен съвет.

Приложение:
Препис от протокол №163/13.03.2018 г.

14.03.2018 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 13.03.2018 г.

Протокол № 163

На 13.03.2018 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.
Състав на катедрения съвет 7. Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Йорданка Димова, доц. д-р Петя Маринова, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева, гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 2. Учебни въпроси:
2.2. Учебни програми по Основи на химията за специалности Инженерна физика (редовно и задочно обучение) и Екоенергийни технологии (редовно обучение) към Физико-технологичен факултет.

Доц. Лекова подложи на обсъждане учебните програми за специалностите Инженерна физика и Екоенергийни технологии.
Гл. ас Тончева, гл. ас. Стефанова и гл. ас. Ангелачева се изказаха в подкрепа на учебните програми.
След проведеното гласуване, учебните програми бяха приети със 7 гласа „за“.

13.03.2018 г.
Пловдив

Протоколчик:
/Милена Славова/

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

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия; Органична химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Инженерна физика (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Основи на химията

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

9

Име на лектора

Доц. д-р Ваня Лекова, доц. д-р Стоянка Атанасова

Учебни резултати за курса

Анотация

Курсът по Основи на химията има за цел да запознае студентите с основни принципи, теории и закономерности в химията и да формира практически умения за лабораторна работа. В теоретичната част на курса се изучават съвременните представи за строежа на атома, съвременни теории за природата на химичната връзка, видове химични взаимодействия и закономерностите, на които те се подчиняват, както и за номенклатурата, структурата и реактивоспособността на органичните съединения, методите за получаването, разпространението, приложението и токсичното им действие. Дават се кратки познания за методите за изследване структурата на молекулите и механизмите на основните типове реакции с оглед по-пълното вникване в тяхната същност.

Практическите упражнения прилагат лекционния материал и формират у студентите опит, умения и навици за работа в химична лаборатория, извършване на основни химични операции и анализиране на експерименталните резултати. В тях са включени и лабораторни задачи за усвояване на основните методи за разделяне и пречистване на неорганични и органични вещества, както и изследване на свойствата и поредица химически превръщания с тях.

Теоретичното съдържание на курса е разработено съобразно факта, че той се изучава през втория семестър от I курс и студентите са с познания по химия, математика и физика, получени от средното училище.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- Теоретичните основи на общата и неорганична химия.
- Да разграничават основните видове органични съединения.
- Да прилагат основните положения на структурната теория и за основните класове органични съединения, техните свойства и области на приложение.

2. *Ще могат*:

- Да извършват основни химични операции: теглене, измерване на обем и плътност на течности, колориметрично определяна на pH на средата, нагряване, накаляване, термостатиране, изсушаване, охлаждане, филтруване и декантиране;
- Да приготвят разтвори с масова част на разтвореното вещество в разтвора (%), с моларна и молеквивалента концентрация;
- Да прилагат познанията си за неорганичните и органични съединения при работа с тях;
- Да познават основните методи за анализ на органичните съединения и възможностите, които те представят.
- Да описват проведените експерименти;
- Да анализират експерименталните резултати;

Начин на преподаване

Аудиторно: 75 ч.

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

Извънаудиторно: 195 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са с добри познания по ***Химия, Математика и Физика***, получени в средния курс на обучение.

Техническо осигуряване на обучението

- Лаборатории, снабдени с камини, сушилни шкафове, спиртни лампи, котлони, вакуум помпи, апарати на Кип, технически везни, рефрактометър на Аббе, поляриметър, както и допълнителни пособия за провеждане на лабораторни упражнения.
- Лабораторни съдове и прибори (стъклени, порцеланови, пластмасови и метални) с универсално и със специално предназначение.
- Литература по обща, неорганична и органична химия.
- Съвременно техническо обезпечаване на обучението.
- Пълноценно оборудване на химическата лаборатория за практически занятия.

Съдържание на курса

Курсът по Основи на химията включва лекции и лабораторни упражнения. В лекциите са разгледани теоретичните основи на общата химия – съвременни представи за строежа на атома, природа на химичната връзка, видове химични взаимодействия, химична кинетика, катализа, химично равновесие, дисперсни системи, както и основните класове органични съединения, като за всеки клас съединения е представена номенклатура, изомерия, структура и реактивоспособност, измерване на физични показатели, както и химични свойства и методи за получаване. Лабораторните упражнения включват теми от лекционния курс. Те изцяло са съобразени с факта, че са първите за студентите упражнения по химия, в които се формират навици за работа в химична лаборатория, създават се умения за извършване на опити и анализиране на получените резултати.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/ Основи на химията

Тема	часове
Строеж на атома Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на електронната обвивка на атома. Съвременни схващания за строежа на електронната обвивка на атома. Вълнов модел за строежа на атома. Физичен смисъл на вълновата функция. Квантови числа. Атомни орбитали. Разпределение на електроните в многоелектронните атоми.	2
Систематика на химичните елементи. Периодичен закон. Периодична система. Периодичен закон и изградената на основата на периодичния закон периодична система. Връзка на структурата на периодичната система на химичните елементи със строежа на електронната обвивка на атомите. Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи	1
Природа на химичната връзка Основни предпоставки за създаване на съвременното развитие на теорията за природата на химичната връзка. Метод на валентните връзки (МВВ). Насищаемост и валентност. Насоченост на химичната връзка. Метод на молекулните орбитали (ММО) – обща характеристика. Сравнителна характеристика на МВВ и ММО. Химична връзка в кондензирани системи – междумолекулни взаимодействия и водородна връзка.	2

Видове химични взаимодействия 2

Фазови и химични превръщания.

Степен на окисление. Разлика в понятието валентност и степен на окисление.

Реакции, протичащи без изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи.

Реакции, протичащи с изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи. Окислително-редукционни взаимодействия. Уравнения на окислително-редукционни процеси.

Окислително-редукционни процеси в практиката. Галванични елементи. Електролиза. Корозия на металите.

Химична кинетика 1

Скорост на химичните реакции.

Влияние на концентрацията на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции.

Зависимост на скоростта на химичните реакции от температурата.

Скорост на химичните реакции, протичащи в хетерогенна среда.

Катализа 1

Основни понятия. Видове катализа. Механизъм на каталитичното действие при хомогенни и хетерогенни каталитични процеси.

Химично равновесие

Химично равновесие в хомогенни системи. Равновесна константа. Особености на химичното равновесие. Фактори, влияещи върху посоката на химичното равновесие. Оптимални условия за протичане на химичните процеси. 2

Химично равновесие в хетерогенни системи. Произведение на разтворимост.

Дисперсни системи

Основни понятия. Класификация на дисперсните системи. Разтвори. Механизъм на разтваряне. Концентрация на разтворите. 4

Разтвори на електролити. Слаби и силни електролити – теория на електролитна дисоциация.

Електролитна дисоциация на водата. Водороден показател. Индикатори. Буферни разтвори.

Киселини и основи.

Неутрализация и хидролиза на соли.

Колоидни разтвори. Обща характеристика. Класификация.

Сорбция. Основни понятия. Адсорбция из разтвори. Приложение на адсорбцията.

Класификация на органичните съединения. 1

Номенклатура. Състав на органичните съединения. Структурна теория-възникване, основни положения и съвременно състояние. Структурни формули. Функционални групи. Изомерия. Химични и физични методи за изследване структурата на органичните съединения.

Пространствена структура на органичните съединения. 1

Молекулни модели и стереохимични формули. Конфигурация на органичните молекули. Асиметричен въглероден атом. Стереохимични номенклатури – относителна и абсолютна (R,S-номенклатура). Енантиомерия. Оптическа активност. Стереоизомерия при съединения с повече от един асиметричен въглероден атом. Диастереомерия: σ- и π-диастереомери.

Въглеводороди. 3

Номенклатура и изомерия. Методи за получаване – промишлени и лабораторни. Реактивоспособност. Радикалови реакции. Циклоалкани. Реактивоспособност на алкени и алкини. Реакции на полимеризация. Арени. Молекулно-орбитален и резонансен модел на бензен. Енергия на делокализация. Свойства. Механизъм на S_E реакции. Ориентация на S_E заместване при моно- и дизаместени производни на бензена. Спектрални свойства на въглеводороди.

2

Халогенопроизводни на въглеводородите.

Класификация и номенклатура. Изомерия. Методи за получаване. Реакции на нуклеофилно заместване при халогенопроизводните на алканите. Реакции на елиминиране - E1 и E2 механизъм. Спектрални свойства на халогенопроизводни.

Хидроксилни производни на въглеводородите. 2

Алкохоли и феноли. Структура, физични и спектрални свойства. Киселинно-основни свойства. Методи за получаване на алкохоли. Реактивоспособност на алкохоли – химични свойства, сравнително разглеждане на свойства на алкохоли и феноли. Окисление на алкохоли и феноли.

Карбонилни съединения. 2

Алдехиди и кетони – физични и спектрални свойства, структура на карбонилната група. Общи методи за получаване. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилния С-атом. Окисление и редукция на карбонилни съединения. Алдолни реакции при алдехиди и кетони.

Мастни и ароматни монокарбоксилни киселини. 2

Номенклатура и изомерия. Спектрални свойства. Методи за получаване. Киселинно-основни свойства на карбоксилните киселини – влияние на въглеводородния остатък. Реактивоспособност на карбоксилната група – реакции на ацилно нуклеофилно заместване, заместване при α-въглероден атом, реакции на декарбоксилиране.

Функционални производни на карбоксилните киселини. Представители и значение на висши мастни киселини. 2

Органични съединения на азота - амини.

Класификация, номенклатура физични и спектрални свойства. Методи за получаване. Структура и киселинно-основни свойства. Влияние на въглеводородния остатък върху основността на амините. Реакции на алкилиране, ацилиране, взаимодействия с карбонилни и карбоксилни съединения.

Общ брой часове: 30

Б/ Упражнения по Основи на химията

тема	часове
Тема I. *Запознаване на студентите с правилата за работата в химичната лаборатория. Техника на безопасност. Приготвяне на разтвори* 1. Приготвяне на разтвор на NaCl с масова част (%) 2. Приготвяне на разтвор на $CuSO_4$ с масова част (%) като се използва кристалохидрат	3
Тема II *Разтворимост* 1. Определяне на разтворимостта на калиев дихромат 2. Топлинен ефект на разтваряне на различни соли	3

Тема III. *Атомно-молекулна теория* 3

1. Количествено определяне на кристализационната вода в кристалохидрат
2. Определяне на качествения състав на основен меден карбонат и съдържанието на меден(II) оксид

Тема IV. *Химична кинетика* 3

1. Определяне на зависимостта на скоростта на химичните реакции от концентрацията
2. Влияние на природата на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции

Тема V. *Химично равновесие* 3

1. Влияние на концентрацията на реагиращите вещества върху химичното равновесие
2. Влияние на концентрацията на оксониевите йони върху химичното равновесие
3. Хетерогенно равновесие

Тема VI. *Катализа*

1. Хомогенна катализа 3
   1.1. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор железен(III) хлорид
   1.2. Автокатализа. Редукция на Mn(VII) с оксалова киселина до манган(II)
2. Хетерогенна катализа
   2.1. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор манган(IV) оксид

Каталитично влияние на водата при взаимодействие на магнезий с йод

Тема VII. *Водороден показател. Буферни разтвори. Хидролиза на соли* 3

1. Колориметрично определяне на pH с различни индикатори
2. Приготвяне на ацетатен буфер
3. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на силна киселина със слаба основа
4. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със силна основа

Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със слаба основа

Тема VIII. *Електролитна дисоциация и електрохимични свойства на разтворите* 3

1. Електропроводимост на твърди и стопени соли
2. Електропроводимост на разтвори
3. Ред на относителна активност на металите
4. Ред на относителна активност на неметалите
5. Електролиза
   a. Електролиза на воден разтвор на натриев хлорид
   b. Анодно разтваряне на мед

Никелиране (отлагане на никел върху мед)

Тема IX. *Методи за пречистване и идентифицираненa органични вещества.* 3

1. Прекристализация. Сублимация.
2. Определяне температура на топене.

Тема X. *Дестилация при атмосферно налягане. Дестилация с водна пара – извличане на етерично масло от лавандула.* 3

Тема XI. *Рефрактометрично изследване на въглехидрати.* 3

Тема XII. *Поляриметрично изследване на оптически активни органични съединения.* 3

Тема XIII. *Свойства на ненаситени въглеводороди. Качествени реакции за доказване* 3

сложна връзка.

Тема XIV. *Свойства на карбонилни съединения. Качествени реакции за карбонилна група. Реакция на сребърно огледало.* 3

Тема XV. *Синтез на аспирин.* 3

Общ брой часове: 45

Г/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да се запознаят самостоятелно с предстоящото лабораторно упражнение: в теоретичен аспект - за същността на опитите, в методично отношение - за химичните операции по тяхното изпълнение. В самостоятелната си работа, студентите се подпомагат с консултации от лектора на курса и ръководителите на семинарните и лабораторни занятия.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
А. Димитров	Неорганична химия I и II част	Пловдивско университетско издателство	1998
Д. Лазаров	Неорганична химия	УИ „Св. Климент Охридски"	2006
В. Лекова, К. Гавазов, А. Димитров	Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия	Пловдивско университетско издателство	2008
Ю. В. Алексашин	Общая химия	Макет плюс, Москва	2012
А. М. Голубев, Ю. А. Лебедев, Г.Н. Фадеев, В. Н. Шаповал	Химия	Юрайт	2014
Ebbing Gammon	General Chemistry	Houghton Mifflin Company, Boston New York	2009
Н. Моллов	Учебник по органична химия	ПУ	1996
Г. Петров	Органична химия	СУ	2006
Хауптман, Ю. Грефе, Х. Ремане	Органична химия.	Наука и изкуство, София	1985
J. Clayden, N. Greenves, St. Varen, P. Wothers	Organic Chemistry	Oxford University Press	2001
В. Червенкова, А. Венков,	Ръководство за лабораторни упражнения по органична химия	Изд. ПУ	2000

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Курсът по Основи на химията включва лекции и лабораторни упражнения. Лабораторните упражнения по Основи на химията са задължителни и включват предварителна, самостоятелна подготовка на студентите по темата от лабораторното упражнение.

Методи и критерии на оценяване

Дисциплината приключва с писмен изпит. Крайната оценка по дисциплината се формира от 2 компонента – 50% от оценката по Обща и неорганична химия + 50% от оценката по Органична химия. Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Ваня Лекова.....

доц. д-р Стоянка Атанасова.....

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

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия; Органична химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Инженерна физика (задочно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Основи на химията

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

7

Име на лектора

Доц. д-р Ваня Лекова, доц. д-р Стоянка Атанасова

Учебни резултати за курса

Анотация

Курсът по Основи на химията има за цел да запознае студентите с основни принципи, теории и закономерности в химията и да формира практически умения за лабораторна работа. В теоретичната част на курса се изучават съвременните представи за строежа на атома, съвременни теории за природата на химичната връзка, видове химични взаимодействия и закономерностите, на които те се подчиняват, както и за номенклатурата, структурата и реактивоспособността на органичните съединения, методите за получаването, разпространението, приложението и токсичното им действие. Дават се кратки познания за методите за изследване структурата на молекулите и механизмите на основните типове реакции с оглед по-пълното вникване в тяхната същност.

Практическите упражнения прилагат лекционния материал и формират у студентите опит, умения и навици за работа в химична лаборатория, извършване на основни химични операции и анализиране на експерименталните резултати. В тях са включени и лабораторни задачи за усвояване на основните методи за разделяне и пречистване на неорганични и органични вещества, както и изследване на свойствата и поредица химически превръщания с тях.

Теоретичното съдържание на курса е разработено съобразно факта, че той се изучава през втория семестър от I курс и студентите са с познания по химия, математика и физика, получени от средното училище.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- Теоретичните основи на общата и неорганична химия.
- Да разграничават основните видове органични съединения.
- Да прилагат основните положения на структурната теория и за основните класове органични съединения, техните свойства и области на приложение.

2. *Ще могат*:

- Да извършват основни химични операции: теглене, измерване на обем и плътност на течности, колориметрично определяна на pH на средата, нагряване, накаляване, термостатиране, изсушаване, охлаждане, филтруване и декантиране;
- Да приготвят разтвори с масова част на разтвореното вещество в разтвора (%), с моларна и молеквивалента концентрация;
- Да описват проведените експерименти;
- Да анализират експерименталните резултати;
- Да прилагат познанията си за неорганичните и органични съединения при работа с тях;
- Да познават основните методи за анализ на органичните съединения и възможностите, които те представят.

Начин на преподаване

Аудиторно: 60 ч.

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

Извънаудиторно: 150 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са с добри познания по ***Химия, Математика и Физика***, получени в средния курс на обучение.

Техническо осигуряване на обучението

- Лаборатории, снабдени с камини, сушилни шкафове, спиртни лампи, котлони, вакуум помпи, апарати на Кип, технически везни, рефрактометър на Аббе, поляриметър, както и допълнителни пособия за провеждане на лабораторни упражнения.
- Лабораторни съдове и прибори (стъклени, порцеланови, пластмасови и метални) с универсално и със специално предназначение.
- Литература по обща, неорганична и органична химия
- Съвременно техническо обезпечаване на обучението
- Пълноценно оборудване на химическата лаборатория за практически занятия.

Съдържание на курса

Курсът по Основи на химията включва лекции и лабораторни упражнения. В лекциите са разгледани теоретичните основи на общата химия – съвременни представи за строежа на атома, природа на химичната връзка, видове химични взаимодействия, химична кинетика, катализа, химично равновесие, дисперсни системи, както и основните класове органични съединения, като за всеки клас съединения е представена номенклатура, изомерия, структура и реактивоспособност, измерване на физични показатели, както и химични свойства и методи за получаване. Лабораторните упражнения включват теми от лекционния курс. Те изцяло са съобразени с факта, че са първите за студентите упражнения по химия, в които се формират навици за работа в химична лаборатория, създават се умения за извършване на опити и анализиране на получените резултати.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/ Основи на химията

Тема	часове
Тема	часове
Строеж на атома Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на електронната обвивка на атома. Съвременни схващания за строежа на електронната обвивка на атома. Вълнов модел за строежа на атома. Физичен смисъл на вълновата функция. Квантови числа. Атомни орбитали. Разпределение на електроните в многоелектронните атоми.	2
Систематика на химичните елементи. Периодичен закон. Периодична система. Периодичен закон и изградената на основата на периодичния закон периодична система. Връзка на структурата на периодичната система на химичните елементи със строежа на електронната обвивка на атомите. Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи	1
Природа на химичната връзка Основни предпоставки за създаване на съвременното развитие на теорията за природата на химичната връзка. Метод на валентните връзки (МВВ). Насищаемост и валентност. Насоченост на химичната връзка. Метод на молекулните орбитали (ММО) – обща характеристика. Сравнителна характеристика на МВВ и ММО.	2

Химична връзка в кондензирани системи – междумолекулни взаимодействия и водородна връзка.

Видове химични взаимодействия 2

Фазови и химични превръщания.

Степен на окисление. Разлика в понятието валентност и степен на окисление.

Реакции, протичащи без изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи.

Реакции, протичащи с изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи. Окислително-редукционни взаимодействия. Уравнения на окислително-редукционни процеси.

Окислително-редукционни процеси в практиката. Галванични елементи. Електролиза. Корозия на металите.

Химична кинетика 1

Скорост на химичните реакции.

Влияние на концентрацията на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции.

Зависимост на скоростта на химичните реакции от температурата.

Скорост на химичните реакции, протичащи в хетерогенна среда.

Катализа 1

Основни понятия. Видове катализа. Механизъм на каталитичното действие при хомогенни и хетерогенни каталитични процеси.

Химично равновесие

Химично равновесие в хомогенни системи. Равновесна константа. Особености на химичното равновесие. Фактори, влияещи върху посоката на химичното равновесие. Оптимални условия за протичане на химичните процеси. 2

Химично равновесие в хетерогенни системи. Произведение на разтворимост.

Дисперсни системи

Основни понятия. Класификация на дисперсните системи. Разтвори. Механизъм на разтваряне. Концентрация на разтворите. 4

Разтвори на електролити. Слаби и силни електролити – теория на електролитна дисоциация.

Електролитна дисоциация на водата. Водороден показател. Индикатори. Буферни разтвори.

Киселини и основи.

Неутрализация и хидролиза на соли.

Колоидни разтвори. Обща характеристика. Класификация.

Сорбция. Основни понятия. Адсорбция из разтвори. Приложение на адсорбцията.

Класификация на органичните съединения. Номенклатура. Състав на органичните съединения. Структурна теория- възникване, основни положения и съвременно състояние. Структурни формули. Функционални групи. Изомерия. Химични и физични методи за изследване структурата на органичните съединения. 1

Пространствена структура на органичните съединения. Молекулни модели и стереохимични формули. Конфигурация на органичните молекули. Асиметричен 1

въглероден атом. Стереохимични номенклатури – относителна и абсолютна (R,S-номенклатура). Енантиомерия. Оптическа активност. Стереоизомерия при съединения с повече от един асиметричен въглероден атом. Диастереомерия: σ- и π-диастереомери.

Въглеводороди. Номенклатура и изомерия. Методи за получаване – промишлени и лабораторни. Реактивоспособност. Радикалови реакции. Циклоалкани. Реактивоспособност на алкени и алкини. Реакции на полимеризация. Арени. Молекулно-орбитален и резонансен модел на бензен. Енергия на делокализация. Свойства. Механизъм на S_E реакции. Ориентация на S_E заместване при моно- и дизаместени производни на бензена. Спектрални свойства на въглеводороди. 3

Халогенопроизводни на въглеводородите. Класификация и номенклатура. Изомерия. Методи за получаване. Реакции на нуклеофилно заместване при халогенопроизводните на алканите. Реакции на елиминиране - E1 и E2 механизъм. Спектрални свойства на халогенопроизводни. 2

Хидроксилни производни на въглеводородите. Алкохоли и феноли. Структура, физични и спектрални свойства. Киселинно-основни свойства. Методи за получаване на алкохоли. Реактивоспособност на алкохоли – химични свойства, сравнително разглеждане на свойства на алкохоли и феноли. Окисление на алкохоли и феноли. 2

Карбонилни съединения. Алдехиди и кетони – физични и спектрални свойства, структура на карбонилната група. Общи методи за получаване. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилния С-атом. Окисление и редукция на карбонилни съединения. Алдолни реакции при алдехиди и кетони. 2

Мастни и ароматни монокарбоксилни киселини. Номенклатура и изомерия. Спектрални свойства. Методи за получаване. Киселинно-основни свойства на карбоксилните киселини – влияние на въглеводородния остатък. Реактивоспособност на карбоксилната група – реакции на ацилно нуклеофилно заместване, заместване при α-въглероден атом, реакции на декарбоксилиране. Функционални производни на карбоксилните киселини. Представители и значение на висши мастни киселини. 2

Органични съединения на азота - амини. Класификация, номенклатура физични и спектрални свойства. Методи за получаване. Структура и киселинно-основни свойства. Влияние на въглеводородния остатък върху основността на аминитe. Реакции на алкилиране, ацилиране, взаимодействия с карбонилни и карбоксилни съединения. 2

Общ брой часове: 30

Б/ Упражнения по Основи на химията

тема	часове
Тема I. *Запознаване на студентите с правилата за работата в химичната лаборатория. Техника на безопасност. Приготвяне на разтвори*	3

1. Приготвяне на разтвор на NaCl с масова част (%)
2. Приготвяне на разтвор на $CuSO_4$ с масова част (%) като се използва кристалохидрат

Тема II. *Химична кинетика и химично равновесие* 3

1. Определяне на зависимостта на скоростта на химичните реакции от концентрацията
2. Влияние на природата на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции
3. Влияние на концентрацията на оксониевите йони върху химичното равновесие

Тема III. *Катализа* 3

1. Хомогенна катализа
    a. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор железен(III) хлорид
    b. Автокатализа. Редукция на Mn(VII) с оксалова киселина до манган(II)
2. Хетерогенна катализа
    a. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор манган(IV) оксид
3. Каталитично влияние на водата при взаимодействие на магнезий с йод

Тема IV. *Водороден показател. Буферни разтвори. Хидролиза на соли* 3

1. Колориметрично определяне на pH с различни индикатори
2. Приготвяне на ацетатен буфер
3. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на силна киселина със слаба основа
4. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със силна основа
5. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със слаба основа

Тема V. *Електролитна дисоциация и електрохимични свойства на разтворите* 3

1. Електропроводимост на твърди и стопени соли
2. Електропроводимост на разтвори
3. Ред на относителна активност на металите
4. Ред на относителна активност на неметалите
5. Електролиза
    a. Електролиза на воден разтвор на натриев хлорид
    b. Анодно разтваряне на мед
6. Никелиране (отлагане на никел върху мед)

Тема VI. *Методи за пречистване и идентифицираненa органични вещества.* 3

1. Прекристализация. Сублимация.
2. Определяне температура на топене.

Тема VII. *Дестилация при атмосферно налягане. Дестилация с водна пара – извличане на етерично масло от лавандула.* 3

Тема VIII. *Рефрактометрично изследване на въглехидрати.* 3

Тема IX. *Поляриметрично изследване на оптически активни органични съединения.* 3

Тема X. *Свойства на ненаситени въглеводороди. Качествени реакции за доказване сложна връзка.* 3

Тема XI. *Свойства на карбонилни съединения. Качествени реакции за карбонилна група. Реакция на сребърно огледало.* 3

Тема XII. *Синтез на аспирин.* 3

Общ брой часове: 45

Г/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да се запознаят самостоятелно с предстоящото лабораторно упражнение: в теоретичен аспект - за същността на опитите, в методично отношение - за химичните операции по тяхното изпълнение. В самостоятелната си работа, студентите се подпомагат с консултации от лектора на курса и ръководителите на семинарните и лабораторни занятия.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
А. Димитров	Неорганична химия I и II част	Пловдивско университетско издателство	1998
Д. Лазаров	Неорганична химия	УИ „Св. Климент Охридски"	2006
В. Лекова, К. Гавазов, А. Димитров	Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия	Пловдивско университетско издателство	2008
Ю. В. Алексашин	Общая химия	Макет плюс, Москва	2012
А. М. Голубев, Ю. А. Лебедев, Г.Н. Фадеев, В. Н. Шаповал	Химия	Юрайт	2014
Ebbing Gammon	General Chemistry	Houghton Mifflin Company, Boston New York	2009
Н. Моллов	Учебник по органична химия	ПУ	1996
Г. Петров	Органична химия	СУ	2006
Хауптман, Ю. Грефе, Х. Ремане	Органична химия.	Наука и изкуство, София	1985
J. Clayden, N. Greenves, St. Varen, P. Wothers	Organic Chemistry	Oxford University Press	2001
В. Червенкова, А. Венков,	Ръководство за лабораторни упражнения по органична химия	Изд. ПУ	2000

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Курсът по Основи на химията включва лекции и лабораторни упражнения. Лабораторните упражнения по Основи на химията са задължителни и включват предварителна, самостоятелна подготовка на студентите по темата от лабораторното упражнение.

Методи и критерии на оценяване

Дисциплината приключва с писмен изпит. Крайната оценка по дисциплината се формира от 2 компонента – 50% от оценката по Обща и неорганична химия + 50% от оценката по Органична химия. Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Ваня Лекова.....

доц. д-р Стоянка Атанасова.....

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

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия; Органична химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Екоенергийни технологии (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Основи на химията

Код на курса

Тип на курса

Задължителен

Равнище на курса (ОКС)

Бакалавър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

7

Име на лектора

Доц. д-р Ваня Лекова, доц. д-р Стоянка Атанасова

Учебни резултати за курса

Анотация

Курсът по Основи на химията има за цел да запознае студентите с основни принципи, теории и закономерности в химията и да формира практически умения за лабораторна работа. В теоретичната част на курса се изучават съвременните представи за строежа на атома, съвременни теории за природата на химичната връзка, видове химични взаимодействия и закономерностите, на които те се подчиняват. В теоретичния раздел са включени последните препоръки на IUPAC (2005) за наименуване на координационни съединения, както и приложение на композиционната номенклатурна система в неорганичната химия. Практическите упражнения прилагат лекционния материал и формират у студентите опит, умения и навици за работа в химична лаборатория, извършване на основни химични операции и анализиране на експерименталните резултати. Теоретичното съдържание на курса е разработено съобразно факта, че той се изучава през първия семестър на обучение и студентите са с познания по химия, математика и физика, получени от средното училище.

Теоретичните и практически знания и умения, получени в курса, са основа за усвояване на материала както по Неорганична химия, така и на химичните дисциплини, изучавани в следващите курсове на обучение.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- Теоретичните основи на общата и неорганична химия.
- Да разграничават основните видове органични съединения.
- Да прилагат основните положения на структурната теория и за основните класове органични съединения, техните свойства и области на приложение.

2. *Ще могат*:

- Да извършват основни химични операции: теглене, измерване на обем и плътност на течности, колориметрично определяна на pH на средата, нагряване, накаляване, термостатиране, изсушаване, охлаждане, филтруване и декантиране;
- Да приготвят разтвори с масова част на разтвореното вещество в разтвора (%), с моларна и молеквивалента концентрация;
- Да описват проведените експерименти;
- Да анализират експерименталните резултати;
- Да прилагат познанията си за неорганичните и органични съединения при работа с тях;
- Да познават основните методи за анализ на органичните съединения и възможностите, които те представят.

Начин на преподаване

Аудиторно: 60 ч.

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

Извънаудиторно: 150 ч

- Самостоятелна подготовка
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са с добри познания по ***Химия, Математика и Физика***, получени в средния курс на обучение.

Техническо осигуряване на обучението

- Лаборатории, снабдени с камини, сушилни шкафове, спиртни лампи, котлони, вакуум помпи, апарати на Кип, технически везни, рефрактометър на Аббе, поляриметър, както и допълнителни пособия за провеждане на лабораторни упражнения.
- Лабораторни съдове и прибори (стъклени, порцеланови, пластмасови и метални) с универсално и със специално предназначение.
- Литература по обща, неорганична и органична химия
- Съвременно техническо обезпечаване на обучението
- Пълноценно оборудване на химическата лаборатория за практически занятия.

Съдържание на курса

Курсът по Основи на химията има за цел да запознае студентите с основни принципи, теории и закономерности в химията и да формира практически умения за лабораторна работа. В теоретичната част на курса се изучават съвременните представи за строежа на атома, съвременни теории за природата на химичната връзка, видове химични взаимодействия и закономерностите, на които те се подчиняват, както и за номенклатурата, структурата и реактивоспособността на органичните съединения, методите за получаването, разпространението, приложението и токсичното им действие. Дават се кратки познания за методите за изследване структурата на молекулите и механизмите на основните типове реакции с оглед по-пълното вникване в тяхната същност.

Практическите упражнения прилагат лекционния материал и формират у студентите опит, умения и навици за работа в химична лаборатория, извършване на основни химични операции и анализиране на експерименталните резултати. В тях са включени и лабораторни задачи за усвояване на основните методи за разделяне и пречистване на неорганични и органични вещества, както и изследване на свойствата и поредица химически превръщания с тях.

Теоретичното съдържание на курса е разработено съобразно факта, че той се изучава през втория семестър от I курс и студентите са с познания по химия, математика и физика, получени от средното училище.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/ Основи на химията

Тема	часове
Строеж на атома	
Предпоставки за развитието на съвременната теория за строежа на електронната обвивка на атома. Съвременни схващания за строежа на електронната обвивка на атома. Вълнов модел за строежа на атома. Физичен смисъл на вълновата функция. Квантови числа. Атомни орбитали. Разпределение на електроните в многоелектронните атоми.	2
Систематика на химичните елементи. Периодичен закон. Периодична система.	1
Периодичен закон и изградената на основата на периодичния закон периодична система. Връзка на структурата на периодичната система на химичните елементи със строежа на електронната обвивка на атомите. Периодичност в изменението на свойствата на атомите на химичните елементи	
Природа на химичната връзка	2
Основни предпоставки за създаване на съвременното развитие на теорията за природата на химичната връзка. Метод на валентните връзки (МВВ). Насищаемост и валентност. Насоченост на	

химичната връзка. Метод на молекулните орбитали (ММО) – обща характеристика.
Сравнителна характеристика на МВВ и ММО.
Химична връзка в кондензирани системи – междумолекулни взаимодействия и водородна връзка.

Видове химични взаимодействия 2
Фазови и химични превръщания.
Степен на окисление. Разлика в понятието валентност и степен на окисление.
Реакции, протичащи без изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи.
Реакции, протичащи с изменение на степента на окисление на атомите на химичните елементи. Окислително-редукционни взаимодействия. Уравнения на окислително-редукционни процеси.
Окислително-редукционни процеси в практиката. Галванични елементи. Електролиза. Корозия на металите.

Химична кинетика 1
Скорост на химичните реакции.
Влияние на концентрацията на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции.
Зависимост на скоростта на химичните реакции от температурата.
Скорост на химичните реакции, протичащи в хетерогенна среда.

Катализа 1
Основни понятия. Видове катализа. Механизъм на каталитичното действие при хомогенни и хетерогенни каталитични процеси.

Химично равновесие
Химично равновесие в хомогенни системи. Равновесна константа. Особености на химичното равновесие. Фактори, влияещи върху посоката на химичното равновесие. Оптимални условия за протичане на химичните процеси. 2

Химично равновесие в хетерогенни системи. Произведение на разтворимост.

Дисперсни системи
Основни понятия. Класификация на дисперсните системи. Разтвори. Механизъм на разтваряне. Концентрация на разтворите. 4
Разтвори на електролити. Слаби и силни електролити – теория на електролитна дисоциация.
Електролитна дисоциация на водата. Водороден показател. Индикатори. Буферни разтвори.
Киселини и основи.
Неутрализация и хидролиза на соли.
Колоидни разтвори. Обща характеристика. Класификация.
Сорбция. Основни понятия. Адсорбция из разтвори. Приложение на адсорбцията.

Класификация на органичните съединения. Номенклатура. Състав на органичните съединения. Структурна теория- възникване, основни положения и съвременно състояние. Структурни формули. Функционални групи. Изомерия. Химични и физични методи за изследване структурата на органичните съединения. 1

Пространствена структура на органичните съединения. Молекулни модели и стереохимични формули. Конфигурация на органичните молекули. Асиметричен въглероден атом. Стереохимични номенклатури – относителна и абсолютна (R,S-номенклатура). Енантиомерия. Оптическа активност. Стереоизомерия при съединения с повече от един асиметричен въглероден атом. Диастереомерия: σ- и π-диастереомери. 1

Въглеводороди. Номенклатура и изомерия. Методи за получаване – промишлени и лабораторни. Реактивоспособност. Радикалови реакции. Циклоалкани. Реактивоспособност на алкени и алкини. Реакции на полимеризация. Арени. Молекулно-орбитален и резонансен модел на бензен. Енергия на делокализация. Свойства. Механизъм на S_E реакции. Ориентация на S_E заместване при моно- и дизаместени производни на бензена. Спектрални свойства на въглеводороди. 3

Халогенопроизводни на въглеводородите. Класификация и номенклатура. Изомерия. Методи за получаване. Реакции на нуклеофилно заместване при халогенопроизводните на алканите. Реакции на елиминиране - E1 и E2 механизъм. Спектрални свойства на халогенопроизводни. 2

Хидроксилни производни на въглеводородите. Алкохоли и феноли. Структура, физични и спектрални свойства. Киселинно-основни свойства. Методи за получаване на алкохоли. Реактивоспособност на алкохоли – химични свойства, сравнително разглеждане на свойства на алкохоли и феноли. Окисление на алкохоли и феноли. 2

Карбонилни съединения. Алдехиди и кетони – физични и спектрални свойства, структура на карбонилната група. Общи методи за получаване. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилния С-атом. Окисление и редукция на карбонилни съединения. Алдолни реакции при алдехиди и кетони. 2

Мастни и ароматни монокарбоксилни киселини. Номенклатура и изомерия. Спектрални свойства. Методи за получаване. Киселинно-основни свойства на карбоксилните киселини – влияние на въглеводородния остатък. Реактивоспособност на карбоксилната група – реакции на ацилно нуклеофилно заместване, заместване при α-въглероден атом, реакции на декарбоксилиране. Функционални производни на карбоксилните киселини. Представители и значение на висши мастни киселини. 2

Органични съединения на азота - амини. Класификация, номенклатура физични и спектрални свойства. Методи за получаване. Структура и киселинно-основни свойства. Влияние на въглеводородния остатък върху основността на амините. Реакции на алкилиране, ацилиране, взаимодействия с карбонилни и карбоксилни съединения. 2

Общ брой часове: **30**

Б/ Упражнения по Основи на химията

тема	часове
Тема I. *Запознаване на студентите с правилата за работата в химичната лаборатория. Техника на безопасност. Приготвяне на разтвори* 1. Приготвяне на разтвор на NaCl с масова част (%) 2. Приготвяне на разтвор на $CuSO_4$ с масова част (%) като се използва кристалохидрат	3
Тема II. *Химична кинетика и химично равновесие* 1. Определяне на зависимостта на скоростта на химичните реакции от концентрацията 2. Влияние на природата на реагиращите вещества върху скоростта на химичните реакции 3. Влияние на концентрацията на оксониевите йони върху химичното равновесие	3
Тема III. *Катализа* 1. Хомогенна катализа a. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор железен(III) хлорид b. Автокатализа. Редукция на Mn(VII) с оксалова киселина до манган(II) 2. Хетерогенна катализа a. Каталитично разлагане на водороден пероксид в присъствие на катализатор манган(IV) оксид 3. Каталитично влияние на водата при взаимодействие на магнезий с йод	3
Тема IV. *Водороден показател. Буферни разтвори. Хидролиза на соли* 1. Колориметрично определяне на pH с различни индикатори 2. Приготвяне на ацетатен буфер 3. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на силна киселина със слаба основа 4. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със силна основа 5. Хидролиза на сол, получена при взаимодействие на слаба киселина със слаба основа	3
Тема V. *Електролитна дисоциация и електрохимични свойства на разтворите* 1. Електропроводимост на твърди и стопени соли 2. Електропроводимост на разтвори 3. Ред на относителна активност на металите 4. Ред на относителна активност на неметалите 5. Електролиза a. Електролиза на воден разтвор на натриев хлорид b. Анодно разтваряне на мед 6. Никелиране (отлагане на никел върху мед)	3
Тема VI. *Методи за пречистване и идентифицираненa органични вещества.* 1. Прекристализация. Сублимация. 2. Определяне температура на топене.	3
ТемаVII. *Дестилация при атмосферно налягане. Дестилация с водна пара – извличане на етерично масло от лавандула.*	3
Тема VIII. *Рефрактометрично изследване на въглехидрати.*	3
Тема IX. *Поляриметрично изследване на оптически активни органични съединения.*	3

Тема X. *Свойства на ненаситени въглеводороди. Качествени реакции за доказване сложна връзка.* 3

Тема XI. *Свойства на карбонилни съединения. Качествени реакции за карбонилна група. Реакция на сребърно огледало.* 3

Тема XII. *Синтез на аспирин.* 3

Общ брой часове: 45

Г/ Самостоятелна подготовка:

Студентите трябва да се запознаят самостоятелно с предстоящото лабораторно упражнение: в теоретичен аспект - за същността на опитите, в методично отношение - за химичните операции по тяхното изпълнение. В самостоятелната си работа, студентите се подпомагат с консултации от лектора на курса и ръководителите на семинарните и лабораторни занятия.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
А. Димитров	Неорганична химия I и II част	Пловдивско университетско издателство	1998
Д. Лазаров	Неорганична химия	УИ „Св. Климент Охридски"	2006
В. Лекова, К. Гавазов, А. Димитров	Ръководство за решаване на задачи по обща и неорганична химия	Пловдивско университетско издателство	2008
Ю. В. Алексашин	Общая химия	Макет плюс, Москва	2012
А. М. Голубев, Ю. А. Лебедев, Г.Н. Фадеев, В. Н. Шаповал	Химия	Юрайт	2014
Ebbing Gammon	General Chemistry	Houghton Mifflin Company, Boston New York	2009
Н. Моллов	Учебник по органична химия	ПУ	1996
Г. Петров	Органична химия	СУ	2006
Хауптман, Ю. Грефе, Х. Ремане	Органична химия.	Наука и изкуство, София	1985
J. Clayden, N. Greenves, St. Varen, P. Wothers	Organic Chemistry	Oxford University Press	2001
В. Червенкова, А. Венков,	Ръководство за лабораторни упражнения по органична химия	Изд. ПУ	2000

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Курсът по Основи на химията включва лекции и лабораторни упражнения. Лабораторните упражнения по Основи на химията са задължителни и включват предварителна, самостоятелна подготовка на студентите по темата от лабораторното упражнение.

Методи и критерии на оценяване

Дисциплината приключва с писмен изпит. Крайната оценка по дисциплината се формира от 2 компонента – 50% от оценката по Обща и неорганична химия + 50% от оценката по Органична химия. Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставената оценка.

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Ваня Лекова.....

доц. д-р Стоянка Атанасова.....

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра АХКХ, проведено на 14.03.2018, бе разгледан и единодушно приет (11 гласа „за“) индивидуален план за работата на редовен докторант по Аналитична химия ***Лидия Иванова Кайнарова*** по тема: ***„Изследване на аналитичните възможности на масспектрометрията с индуктивно свързана плазма за идентификация, охарактеризиране и определяне на наночастици ”*** с научни ръководители: ***доц. д-р Виолета Стефанова и гл. ас. д-р Деяна Георгиева***.

Моля, Факултетният съвет да одобри предложения план на докторанта.

Прилагам:
1. Индивидуален план за работа на докторанта ***Лидия Кайнарова;***
2. Препис-извлечение от Протокол на КС на КАХКХ.

15.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 14.03.2018

ПРОТОКОЛ №4

На 14.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11

Присъстват 11

Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:

1.Годишни отчети на докторантите в катедрата

2.Учебни въпроси

3.Текущи въпроси

По точка 2.1 от дневния ред беше разгледано предложение за индивидуалния план на докторант Лидия Иванова Кайнарова.

Предложението се обсъди и след гласуване се прие с 11 гласа „за”.

16.03.20178 Протоколчик:

/П. Балабанова/

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО И НАУКАТА

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

Докторантура: редовна (редовна, самост. подг.)

Химически факултет
Катедра по Аналитична химия и компютърна химия

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Лидия Иванова Кайнарова
2. Дата на записване в докторантура: 01.03.2018
3 Заповед № РЗ3 – 863 от 23.02.2018 година
4. Срок за завършване на докторантурата: 01.03.2021 година
5. Област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика
6. професионално направление 4.2. Химически науки

   докторска програма: Аналитична химия
7. Тема на дисертационния труд: „Изследване на аналитичните възможности на масспектрометрията с индуктивно свързана плазма за идентификация, охарактеризиране и определяне на наночастици"
8. утвърдена от ФС, протокол № 195 от 20.02.2018 година
7. Научен ръководител: доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова,
   гл. ас. д-р Деяна Любомирова Георгиева
8. Идивидуалният учебен план за работа е утвърден от ФС протокол №…… от ……

УТВЪРЖДАВАМ: РЕКТОР: ……
(……)

ДЕКАН: ……
(……)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА ОТ ПОГДОГОТВКАТА

Дейности	Период	Форми
I. Анализ на състоянието на изследванията по проблема		
1. Работа над дисертацията – литературен обзор: преглед и обобщение на научните публикации за: • проблематиката, касаеща идентификация, охарактеризиране и контролиране нивата на различни видове наноматериали (наночастици) върху природни и биологични обекти. • употребата на наночастици в различни индустриални и здравни направления като: електроника, медицина, производството на енергия и потребителски продукти. • развитие на съвременните методи за пробовъвеждане, анализ и охарактеризиране на наночастици.	03.2018 – 03.2019	Самостоятелна работа с научна литература; Консултации с научния ръководител; Отчет
2. Експериментални проучвания върху темата на изследването: • Поставяне на цели и задачи на изследването: избор на конкретни видове наночастици, които ще бъдат обект на настоящото изследване • Изследвания върху стабилизиране на наноколоидни системи с цел осигуряване на надеждно и възпроизводимо регистриране на сигнали от единични частици– влияние на състава на носещия разтворител и киселинността на средата; физически подходи за хомогенизиране на системите; оптимизиране на условия за пулверизация; охарактеризиране на транспортни загуби; • Разработване и тестване на подходи за охарактеризиране на времевите сигнали генерирани от единични наночастици	08.2018 – 03.2019	Лабораторна работа; Отчет
3. Участие в научни форуми	03.2018 – 03.2019	Съвместно с научния ръководител; Отчет
4. Посещение на специализиращи курсове лекции, свързани с темата на дисертационния труд	03.2018 – 03.2019	Сертификати за преминато обучение
5. Представяне на годишен отчет на докторанта	03.2019	Отчет

Ръководител на катедра:…….
(……..)

Научен ръководител:……..
(……..)

Научен ръководител:……
(……..)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА ОТ ПОГДОГОТВКАТА

Дейности	Период	Форми
1. Експериментална работа върху темата на изследването: • Определяне на елементен състав на наночастиците • Изследване на възможностите на SP-ICP-MS метода за определяне „концентрация“ на наноразмерния материал (брой наночастици в единица обем). Обем на въведената порция и пределно разреждане. • Определяне на размер на наночастиците и охарактеризиране на разпределението по размери на полидисперсни наноколоидни системи чрез SP-ICP-MS. • Подходи за калибриране при определяне размер на наночастиците. Аналитични характеристики - линейност и граничен размер на определяните частици. • Изследване на спектрални и неспектрални пречещи влияния и методи за корекцията им.	03.2019-09.2019	Лабораторна работа; Отчет
2. Работа над дисертацията: • оформяне на експерименталната работа по разработените методи	09.2019-03.2020	Самостоятелна работа и консултации с научния ръководител Отчет
3. Полагане на изпит по специалността	09.2019-02.2020	Самостоятелна подготовка; консултации; Изпит
4. Участие в научни форуми	03.2019-09.2019	Съвместно с научния ръководител; Отчет
5. Преподавателска дейност • провеждане на практически занятия по със студенти, обучавани в ХФ на ПУ	03.2019-02.2020	Провеждане на курс упражнения със студенти
6. Посещение на специализиращи курсове лекции, свързани с темата на дисертационния труд	03.2019–03.2020	Сертификати за преминато обучение
7. Подготовка на научна публикация	09.2019-03.2020	Публикация
8. Представяне на годишен отчет на докторанта	03.2020	Отчет

Ръководител на катедра:……..
(……..)

Научен ръководител:……
(……..)

Научен ръководител:……
(……..)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА ОТ ПОГДОГОТВКАТА

Дейности	Период	Форми
1. Експериментална работа върху темата на изследването: • Валидиране на SP-ICP-MS методите за охарактеризиране на размери и състав на наночастици и изследване потенциала на SP-ICP-MS за получаване на допълнителна информация. • Изследване на възможностите на SP-ICP-MS за охарактеризиране на равновесното състояние твърда фаза/разтвор при анализ на колоидни системи от наночастици • Избор на подходящи математични и статистически подходи за обработка на данните. Оценка на аналитичните характеристики на SP-ICP-MS метода • Изследване на възможностите за идентификация на покрития при анализ на наноразмерни композити със структура ядро-обвивка. Оценка на възможностите на SP-ICP-MS за определяне на покрития.	03.2020-09.2020	Публикации, участие в конференции
2. Преподавателска дейност • провеждане на практически занятия по със студенти, обучавани в ХФ на ПУ	03.2020-02.2021	Провеждане на курс упражнения със студенти
3. Подготовка на научна публикация	09.2020-12.2021	Самостоятелна работа и консултации с научния ръководител Отчет
4. Подготовка на цялостно оформения дисертационен труд	09.2020-03.2021	
5. Отчисляване с право на защита	03.2021	Представяне на резултатите от дисертационния труд пред КС

Ръководител на катедра:……..
(……..)

Научен ръководител:……
(……..)

Научен ръководител:……
(……..)

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,

Въз основа на решение на заседание на катедрения съвет, състоял се на 13.03.2018, предлагам да внесете за утвърждаване от ФС на индивидуалния план за тригодишния срок на обучение на докторант Петя Иванова Герасимова по
област на висше образование: 1. Педагогически науки
професионално направление: 1.3. Педагогика на обучението по...
докторска програма: Методика на обучението по химия с
научен ръководител: гл.ас.д-р Йорданка Стефанова и
темата на докторантурата *„Развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет химия и опазване на околната среда – 8 и 9 клас“*.

Приложение:
Препис от протокол №163/13.03.2018 г.

14.03.2018 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 13.03.2018 г.

Протокол № 163

На 13.03.2018 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.
Състав на катедрения съвет 7.
Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Петя Маринова, доц. д-р Йорданка Димов, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева и гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 2. Учебни въпроси:

2.1. Обсъждане на индивидуален план за тригодишния срок на обучение на докторант Петя Иванова Герасимова по дисертационнен труд на тема „*Развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет химия и опазване на околната среда – 8 и 9 клас*“ с научен ръководител гл.ас. д-р Йорданка Стефанова. Дисертационният труд е по професионално направление: 1.3. Педагогика на обучението по...; докторска програма: Методика на обучението по химия

По т.2.1. от дневния ред доц. Лекова зададе следните въпроси:
В работния план за първата година, от научноизследователската дейност (I.), т. 3 не е ли по-добре да бъде прецезирана в частта си за разработване на идеен проект, всички проекти са основани на някаква идея? В часта обучение (II.), в работните планове през трите години на обучение, са посочени три курса и отделно избираеми два курса и един факултативен. Как се провеждат и организират тези курсове? През втората година не е ли по-добре докторантският минимум да не бъде отбелязан в скоби, след курса теория и методология на химическото образование, а да се посочи като отделен елемент в работния план?
гл.ас. д-р Йорданка Стефанова обясни, че в докторската програма по методика на обучението по химия за всеки избираем курс са посочени отделни дисциплини, които могат да бъдат избрани. В зависимост от това, дали те се четат и на други студенти, докторантът се обучава заедно с тях или курсът се провежда в индивидуална форма на обучение. По работния план от първата година от научноизследователската работа т.3 ще бъде променена, както и докторантският минимум през втората година на обучение ще е посочен отделно.
Други въпроси по индивидуалния план на докторанта не възникнаха и се премина към гласуване.
След проведеното гласуване, индивидуалният план бе приет със 7 гласа „за“.

13.03.2018 г.
Пловдив

Протоколчик:
/Милена Славова/

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО И НАУКАТА

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

Докторантура: редовна

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

ИНДИВИДУАЛЕН УЧЕБЕН ПЛАН ЗА РАБОТА НА ДОКТОРАНТА

1. Име, презиме, фамилия Петя Иванова Герасимова
2. Дата на записване в докторантура 01.03.2018 година
3. Заповед № Р33-864 от 23.02.2018 година
4. Срок за завършване на докторантурата 01. 03. 2021 година
5. Област на висше образование 1. Педагогически науки
6. Професионално направление 1.3. Педагогика на обучението по....

   докторска програма „Методика на обучението по химия"
7. Тема на дисертационния труд „Развитие на ключови компетентности чрез обучението по учебния предмет Химия и опазване на околната среда – 8. и 9. клас", утвърдена от ФС, протокол № 195 от 20.02.2018 година
8. Научен ръководител гл. ас. д-р Йорданка Петрова Стефанова
9. Идивидуалният учебен план за работа е утвърден от ФС протокол №..... от

   .....

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

ДЕКАН: .....
(доц. д-р Веселин Кметов)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ПЪРВАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Форми
I. Научноизследователска дейност 1. Извършване на литературно проучване на изследвания в областта на природните науки, свързани с формиране и развитие на ключови компетентности. 2. Описание и систематизиране на предхождащи изследвания по темата в областта на природните науки. 3. Разработване на проект за педагогическо изследване. 4. Подготовка и провеждане на предварителен педагогически експеримент, анализ на получените резултати.	01.03.2018 год. – 20.12.2018 год. 15.09.2018 год. – 31.01.2019 год.	Изготвена библиографска справка. Текст – първа глава от дисертацията Формулировка на целите и задачите на изследването
II. Обучение 1. Курс „Методология и методи на педагогическите изследвания 2. Факултативен курс „Английски език"	01.03.2018 год. – 20.02.2019 год. 30.06.2018 – 31.08. 2019 год.	Оценка от курсова работа Сертификат
III. Педагогическа дейност 30 учебни часа в зависимост от учебния план на катедрата	2018/2019 учебна година	

Ръководител на катедра: .....
(доц. д-р Ваня Лекова)

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

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ВТОРАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Форми
I. Научноизследователска дейност 1. Подготовка и провеждане на основен педагогически експеримент 2. Анализ на резултатите от проведения педагогически експеримент.	01.03. – 20. 12. 2019 год. 01.01 – 01.03. 2020 година	Документация Публикации, участие в конференции Втора глава на дисертацията
II. Обучение 1. Теория и методология на химическото образование" - докторански минимум 2. Избираем курс „Психология" 3. Избираем курс „Педагогика"	01.03.2019 – 20. 12. 2020 год. 01.09. - 20.12 – 2020 година	Оценка от изпит Оценка от курсова работа Оценка от курсова работа
III. Педагогическа дейност 30 учебни часа в зависимост от учебния план на катедрата	2019 / 2020 учебна година	

Ръководител на катедра:……
(доц. д-р Ваня Лекова)

Научен ръководител:……
(гл.ас. Йорданка Стефанова)

РАБОТЕН ПЛАН ЗА ТРЕТАТА ГОДИНА ОТ ПОДГОТОВКАТА

Дейности	Период	Форми
I. Научноизследователска дейност 1. Подготовка и провеждане на заключителен педагогически експеримент 2. Анализ на получените резултати 3. Съставяне и редактиране на текста на дисертационния труд 4. Предзащита на дисертацията	01.03 – 01.07.2021 година 01.07 – 20.12.2021 година 01.02. – 28.02. 2021 година	Трета глава на дисертацията Публикации, участие в конференции Ръкопис на дисертационния труд Проведена предзащита
II. Обучение 1. Курс „Актуални проблеми на обучението по природни науки"	01.05 – 01.06.2021 година	Оценка от курсова работа
III. Педагогическа дейност 30 учебни часа в зависимост от учебния план на катедрата	2020 / 2021 година	

Ръководител на катедра:……..
(доц. д-р Ваня Лекова)

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

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено на 16.03.2018 г., бе разгледан ***отчетът на редовен докторант Мария Василева Френкева за първата година от докторантурата ѝ***. Научният ръководител проф. дн Пламен Пенчев запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от съръководителя доц. д-р Марин Маринов, и предложи оценка за първата година на докторантурата Отличен (6). След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научните ръководители бяха единодушно приети с 11 гласа „за“.

Предлагаме на ФС на ХФ да приеме отчетът на Мария Френкева с оценка Отличен (6).

Прилагам:

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

16.03.2018 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 16.03.2018

ПРОТОКОЛ №5

На 14.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11
Присъстват 11
Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:
1.Годишни отчети на докторантите в катедрата
2.Учебни въпроси
3.Кадрови въпроси
4.Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Мария Василева Френкева за първата година от редовната й докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Отличен (6).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Мария Василева Френкева за първата година от редовната й докторантура с оценка Отличен (6).

16.03.20178 Протоколчик:

/П. Балабанова/

СТАНОВИЩЕ

от проф. д.н. Пламен Николов Пенчев - научен ръководител на докторанта

(съгласувано с втория ръководител на докторанта)

за работа през първата година на докторант **Мария Василева Френкева**

- Тема на дисертационния труд „**Отнасяне на вибрационни и ЯМР спектри на органични съединения**“, утвърдена от ФС, протокол № 186 от 31.01.2017 година.
- Дата на записване в докторантура : 01.03.2017 година, със заповед № Р33-671 от 16.02. 2017 година. Срок за завършване на докторантурата 01.03.2020 година
- Област на висше образование: „4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление: „4.2. Химически науки“, докторска програма: „Аналитична химия“

За отчетния период 1.3.2017 г. – 28.2.2018 г. Мария Френкева е изпълнила всички планувани дейности от нейния индивидуален работен план – те са описани подробно в нейния годишен отчет. За мен най-важните постижения са, че докторант Френкева се научи да интерпретира и отнася сигналите на протонните и С-13 ЯМР спектри с помощта на едномерните и двумерните техники на ЯМР спектроскопията. Спектрите на десет съединения са отнесени с помощта на ^{1}H-, ^{13}C-ЯМР и DEPT-135 спектри, както и двумерните корелационни спектри HMQC (HSQC), ^{1}H-^{1}H – COSY, HMBC, и в някои от случаите NOESY спектри. Тя разучи работата с програмата GAUSSIAN 98W и за всичките десет съединения са изчислени геометриите им и техните сигнали в ^{1}H- и ^{13}C-ЯМР спектри.

В лабораторията на втория ръководител, доц. Марин Маринов, тя участваше в синтез на нови вещества - ацетилни производни на спирохидантоини и техни дитиоаналози. Доколкото разбрах тази дейност е проведена от нея под непосредственото ръководство на доц. Маринов.

Имайки предвид обемът на извършената от нея работа, както и високото качество на нейното изпълнение, **моята оценка за работа на докторанта отлична**.

Научни ръководители: . . . . . .

1. Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

. . . . . .

2. Доц. д-р Марин Нейков Маринов

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

за периода 01.03.2017 до 28.02.2018г.
на
Мария Василева Френкева,
редовен докторант към катедра “Аналитична химия и Компютърна химия”
на Химически факултет

Тема на дисертационната работа: **„Отнасяне на вибрационни и ЯМР спектри на органични съединения ”**

Научни ръководители: Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев
Доц. д-р Марин Нейков Маринов

I. Обучение:
Участвала съм в семинари с научният ми ръководител проф. д.н. Пенчев относно принципа и приложението на ЯМР спектри за откриване структурата на органични съединения, както и приложението на квантовохимичните методи за изчисляване на ЯМР спектрите им.
Участвала съм в семинари с научният ми ръководител доц. д-р. Маринов относно получаването на спирохидантоини и техни производни.

II. Експериментална работа:
Запознах се с програмата за анализ на ЯМР спектри MestReNova, както и програмите за моделиране на органични съединения: ISISDraw, ChemDraw, PCModel, GaussView, Gaussian 98W и използването им за предвиждане на отместването на сигналите в ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектрите. С тяхна помощ отнесох ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектрите на: 4,5- диазофлурен-9-он; 3-метил-9-флуорен-5-спирохидантоин; 4’-бром-(9’-флуорен)-спиро-5-хидантоин; 1,3-бис(хидроксиметил) -9'-флуорен-спиро-5-хидантоин; клероиндицин F; клероиндицин B; (9*H*-флуорен-9-ил)-уреа; 2-тиоурацил; 6-метил-2-тиоурацил; 2, 4-дитиоурацил и 6-метилурацил.
С помоща на квантово-химични методи са изчислени отместванията на вече отнесените сигнали в ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектри на тези съединения.
Запознах се с устройството и работата на ИЧ апарата PE 1750.
Синтез на ацетилни производни на спирохидантоини и техни дитиоаналози.

III. Посещение на курсове и семинари:
Участие с постер на тема: Full assignment of ^{1}H and ^{13}C NMRspectra of (9*H*-fluoren-9-yl)-urea на 56-та Годишна научна конференция на Русенски университет Филиал - Разград Индустрия 4.0. Бизнес среда. Качество на живот.

Посещение на семинар ораганизиран от FOT ltd. съвместно с Honeywell на тема: „Определяне на вода чрез Карл Фишер титруване“.

IV. Публикации по дисертацията:
Maria Frenkeva, Marin Marinov, Plamen Penchev, “ Full assignment of ^{1}H and ^{13}C NMR spectra of (9H-fluoren-9-yl)urea ”, Reports Awarded with "Best Paper" Crystal Prize, 56th Science Conference of Ruse University , 211-214 (2017)

Докторант: .....

/Мария Френкева/

Научни ръководители : .....

/ Проф. д.н. Пламен Пенчев /

.....

/ Доц. д-р Марин Маринов /

28.02.2018 г.

Ръководител катедра:.....

/Доц. д-р Кирил Симитчиев/

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

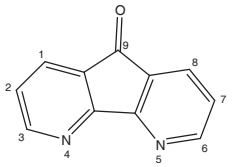
за периода 01.03.2017 до 28.02.2018г.
на
Мария Василева Френкева,
редовен докторант към катедра "Аналитична химия и Компютърна химия"
на Химически факултет

Тема на дисертационната работа: **„Отнасяне на вибрационни и ЯМР спектри на органични съединения "**

Научни ръководители: Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев
Доц. д-р Марин Нейков Маринов

ПРОТОКОЛ

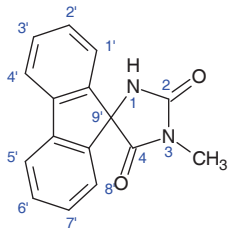
Работна задача: Отнасяне на ЯМР спектри на органични съединени



4,5-diazafluoren-9-one

Table 1. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for 4,5-diazafluoren-9-one

position	δ ^{13}C	δ ^{1}H	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1	131.59	8.10	dd, (7.5, 1.5)	2,3[b]	3,9
2	125.22	7.52	dd, (7.5, 5.0)	1,3	3,4a,9[b]
3	154.86	8.81	dd, (5.0, 1.5)	1[b],2	4a,
1a	162.76				
4a	129.16				
9	189.44				



3-methyl-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

Table 2. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for 3-methyl-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

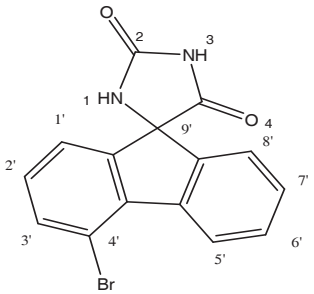
position	δ ^{13}C	δ ^{1}H	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1		8.87	s		2, 4, 9'
2	157.58				
3					
4	173.06				
5	25.49	3.00	s		2, 4
1'/8'	124.29	7.47	d (7.9)	2'	2'[b], 3', 4'[b], 4a', 9'
2'/7'	128.76	7.35	td (7.5, 0.9)	1', 3'	1'[c], 3'[b], 4', 1a', 9'[c]
3'/6'	130.36	7.50	dd (7.5, 0.9)	2', 4'	1', 2'[c], 4'[c], 4a'
4'/5'	121.20	7.90	d (7.5)	3'	1'[c], 2', 3'[c], 1a', 4a'
9'	71.54				
1a'/8a'	143.13				
4a'/5a'	141.16				

a)In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 3. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry for 3-methyl-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

position	δ ^{13}C	QC ^{13}C	δ ^{1}H	QC ^{1}H
1			8.87	2.42
2	157.58	157.38		
3				
4	173.06	179.47		
5	25.49	23.13	3.00	3.57
1'/8'	124.29	129.94	7.47	7.47
2'/7'	128.76	129.46	7.35	7.34
3'/6'	130.36	133.28	7.50	7.55
4'/5'	121.20	120.89	7.90	7.78
9'	71.54	54.05		
1a'/8a'	143.13	145.23		
4a'/5a'	141.16	143.61		

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.



4’-бром-(9’-флуорен)-спиро-5-хидантои

Table 4. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for 4’-brome-9’-fluorenespiro-5-hydantoin

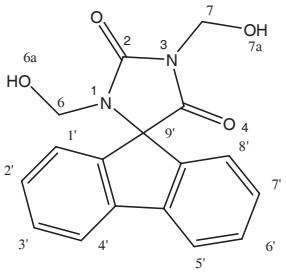
position	δ ^{13}C	δ ^{1}H	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1		8.61	s		2[b], 4, 9’
2	157.71	-			
3		11.31	s		
4	173.75	-			
1’	127.02	7.76	d (8.8)	-	3’, 4’[b], 4a’,9’[c]
2’	122.82	7.88	dd (15.0, 8.0)	3’	1a’, 3’[b], 4’, 4a’[b]
3’	132.95	7.70	d (8.1)	2’	1’, 4a’, 4’[b]
4’	121.27	-			
5’	121.24	7.92	d (7.5)	6’	4a’[b], 7’, 8a’
6’	130.19	7.50	t (6.0)	5’, 7’	5a’, 8’
7’	129.00	7.40	t (7.4)	6’, 8’	5’, 8a’
8’	123.73	7.46	d (7.5)	7’	5a’, 6’, 9’[b]
9’	72.35	-			
1a’	145.31	-			
4a’	140.19	-			
5a’	139.71	-			
8a’	143.04	-			

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 5. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry for 4'-brome-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

position	δ ^{13}C	QC ^{13}C	δ ^{1}H	QC ^{1}H
1			8.61	4.15
2	157.71	159.73	-	
3			11.31	6.46
4	173.75	176.62	-	
1'	127.02	127.43	7.76	7.57
2'	122.82	129.99	7.88	7.33
3'	132.95	138.55	7.70	7.70
4'	121.27	133.06	-	
5'	121.24	128.35	7.92	8.82
6'	130.19	133.02	7.50	7.66
7'	129.00	131.41	7.40	7.52
8'	123.73	126.22	7.46	7.58
9'	72.35	63.14	-	
1a'	145.31	148.32	-	
4a'	140.19	144.80	-	
5a'	139.71	143.50	-	
8a'	143.04	146.18	-	

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.



1,3-бис(хидроксиметил)-9'-флуорен-спиро-5-хидантоин

Table 6. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for 1,3-hydroxymethyl-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

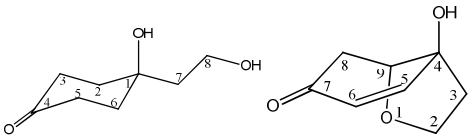
position	δ ^{13}C	δ ^{1}H	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1	-	-		-	
2	155.77	-		-	
3	-	-		-	
4	171.55	-		-	
6	64.09	4.40	d (6.7)	6a	2, 9'
6a	-	5.77	t (6.8)	6	6[b]
7	62.17	4.91	d (7.0)	7a	2, 4
7a	-	6.57	t (7.1)	7	7[b]
1'	124.66	7.38	dd (6.8,NA)		3', 9'[b], 4a'[c]
2'	128.52	7.35	td (7.2, NA)	3'	4', 1a'
3'	130.46	7.51	td (7.4; 1.4)	2',4'	1',2'[b], 4a'
4'	121.26	7.93	d (7.6)	3'	2', 1a'
5'	121.26	7.93	d (7.6)	6'	7', 8a'
6'	130.46	7.51	td (7.4; 1.4)	5', 7'	7',8', 5a'
7'	128.52	7.35	td (7.2, NA)	6'	5',8a'
8'	124.66	7.38	dd (6.8, NA)		6', 9'[b], 5a'[c]
9'	74.16	-		-	
1a' / 8a'	141.12	-		-	
4a' / 5a'	141.60	-		-	

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 7. Comparison of experimental 1H NMR and 13C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry for 1,3-hydroxymethyl-9'-fluorenespiro-5-hydantoin

position	δ ^{13}C	QC ^{13}C	δ ^{1}H	QC ^{1}H
1	-		-	
2	155.77	168.53	-	
3	-		-	
4	171.55	176.36	-	
6	64.09	58.47	4.40	3.81
6a	-		5.77	
7	62.17	57.13	4.91	4.71
7a	-		6.57	
1'	124.66	128.96	7.38	7.57
2'	128.52	129.92	7.35	7.39
3'	130.46	133.88	7.51	7.62
4'	121.26	122.40	7.93	7.89
5'	121.26	122.40	7.93	7.89
6'	130.46	133.88	7.51	7.62
7'	128.52	129.92	7.35	7.39
8'	124.66	128.96	7.38	7.57
9'	74.16	66.19	-	
1a' / 8a'	141.12	143.76	-	
4a' / 5a'	141.60	145.93	-	

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.



Cleroindicin B Cleroindicin F

Table 8. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for cleroindicin B (**1**).

position	δ ^{13}C ppm	δ ^{1}H ppm	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1	70.52	-			
2*eq*	37.04	2.12	dtd (9.4, 6.4, 3.2)	2*ax*, 3*eq*, 3*ax*	1[b], 3, 4[b], 7[c]
2*ax*	37.04	1.76	td (13.4, 5.0)	2*eq*, 3*eq*, 3*ax*	1, 3, 4[b], 8
3*eq*	36.78	2.24	ddd (7.7, 5.3, 2,9)	2*ax*, 2*ax*, 3*ax*	1[c], 2[b], 4[c]
3*ax*	36.78	2.75	td (7.8, N/A)	2*eq*, 2*ax*, 3*eq*	1[b], 2, 4
4	212.67	-			
5*eq*	36.78	2.24	ddd (7.7, 5.3, 2,9)	6*ax*, 6*ax*, 5*ax*	1[c], 6[b], 4[c]
5*ax*	36.78	2.75	td (7.8, N/A)	6*eq*, 6*ax*, 5*eq*	1[b], 6, 4
6*eq*	37.04	2.12	dtd (9.4, 6.4, 3.2)	6*ax*, 5*eq*, 5*ax*	1[b], 5, 4[b], 7[c]
6*ax*	37.04	1.76	td (13.4, 5.0)	6*eq*, 5*eq*, 5*ax*	1, 5, 4[b], 8
7	41.49	1.81	t (N/A)	8	1, 2[b], 6[b], 8
8	59.76	3.98	t (N/A)	7	1, 7
OH		3.66	s		
OH		2.64	s		
OH		1.92	s		

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 9.Cleroindicin B - Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry

Position	*δ* ^{13}C ppm	QC ^{13}C ppm	*δ* ^{1}H ppm	QC ^{1}H ppm
1	70.52	65.18	-	
2/6	37.04	33.89	2.12 / 1.76	1.16 / 0.88
3/5	36.78	33.31	2.24 / 2.75	1.65 / 2.17
4	212.67	214.29	-	
7	41.49	42.95	1.81	1.04
8	59.76	55.60	3.98	3.28

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set

Table 10. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for cleroindicin F (**2**).

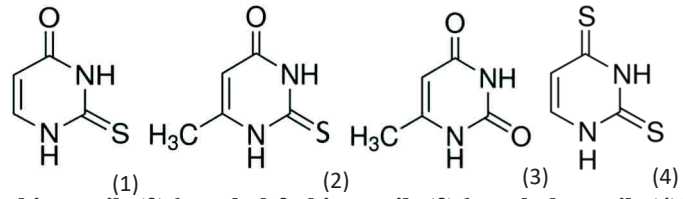
position	*δ* ^{13}C ppm	*δ* ^{1}H ppm	m, *J* (in Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
2*eq*	66.21	4.07	td (8.5, 6.5)	2*ax*, 3*eq*, 3*ax*	3[b], 4, 9[b]
2*ax*	66.21	3.93	dd (15.1, 8.3)	2*eq*, 3*eq*, 3*ax*	3, 4, 9
3*eq*	39.36	2.33	ddd (13.2, 8.3, 6.7)	2*eq*, 2*ax*, 3*ax*	2, 4, 5, 9[b]
3*ax*	39.36	2.21	m (2.24 – 2.19)	2*eq*, 2*ax*, 3*eq*	2, 4, 5, 9
4	75.30	-			
5	148.40	6.78	dd (10.2, 1.0)	6	3[b], 7, 9
6	128.44	6.00	d (10.2)	5	4, 7[c], 8
7	197.32	-			
8*eq*	40.04	2.60	dd (16.9, 5.6)	8*ax*, 9	4, 6[b], 7, 9
8*ax*	40.04	2.78	dd (16.9, 4.6)	8*eq*, 9	4, 6[c], 7, 9
9	81.35	4.24	t (4.3)	8*eq*, 8*ax*	2[b], 3[c], 4, 5, 7
OH		2.10	s	2*eq*, 2*ax*, 3*eq*	2[c], 4[b], 9[c]

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 11.Cleroindicin F - Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry

Position	δ ^{13}C ppm	QC ^{13}C ppm	δ ^{1}H ppm	QC ^{1}H ppm
2	66.21	59.76	4.07 3.93	3.65 3.30
3	39.36	36.95	2.33 2.21	2.29 1.74
4	75.3	67.50	-	
5	148.4	154.12	6.78	6.79
6	128.44	135.68	6.00	6.32
7	197.32	201.95	-	
8	40.04	36.06	2.60 2.78	2.03 2.78
9	81.35	73.53	4.24	3.77

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.



(1)2-thiouracil; (2)6-methyl-2-thiouracil; (3)6-methyl-uracil; (4)2,4-dithiouracil

Table 12. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for **2-thiouracil** [600.13 MHz (^{1}H) and 150.903 MHz (^{13}C)][a]

Atom	δ (^{13}C) ppm	DEPT-135	δ (^{1}H) ppm	Multiplicity (*J*, Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1 (NH)	–	–	12.29	br. s	3[c], 5[c], 6	
2 (C=S)	176.09	C	–	–	–	
3 (NH)	–	–	12.45	br. s	1[c] , 5[b]	
4 (C=O)	161.03	C	–	–	–	
5	105.32	CH	5.81	ddd (7.6, 1.9, 1.3)	1[c], 3[b], 6	4[c)], 6
6	142.14	CH	7.41	dd (7.6, 5.6)	1, 5	2, 4, 5

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra.b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 13**.** Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry for 2-thiouracil

Atom	δ (^{13}C) ppm	QC ^{13}C	δ (^{1}H) ppm	QC ^{1}H
1 (NH)	–		12.29	5.91
2 (C=S)	176.09	193.16	–	
3 (NH)	–		12.45	7.33
4 (C=O)	161.03	164.34	–	
5	105.32	103.84	5.81	5.84
6	142.14	143.40	7.41	7.11

Table 14. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for **6-methyl-2-thiouracil** [600.13 MHz (^{1}H) and 150.903 MHz (^{13}C)][a]

Atom	δ (^{13}C) ppm	DEPT -135	δ (^{1}H) ppm	Multiplicity (*J*, Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1 (NH)			10.82	bs		
2 (C=S)	164.16	C				
3 (NH)			10.88	bs	5	
4 (C=O)	152.93	C				
5	98.76	CH	5.31	s	3, 7	2[b], 4, 7
6	151.61	C				
7	18.21	CH_3	2.00	d (0.8, 3H)	5	4, 5

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak

Table 15. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry 6-methyl-2-thiouracil

Atom	δ (^{13}C) ppm	QC ^{13}C	δ (^{1}H) ppm	QC ^{1}H
1 (NH)			10.82	5.91
2 (C=S)	164.16	193.42		
3 (NH)			10.88	7.17
4 (C=O)	152.93	163.12		
5	98.76	99.61	5.31	5.61
6	151.61	152.97		
7	18.21	17.52	2.00	2.23

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set

Table 16. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for **6-methyl-uracil** [600.13 MHz (^{1}H) and 150.903 MHz (^{13}C)][a]

Atom	δ (^{13}C) ppm	DEPT-135	δ (^{1}H) ppm	Multiplicity (*J*, Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1 (NH)			12.29	s		
2 (C=O)	175.89	C				
3 (NH)			12.29	s		
4 (C=O)	161.08	C				
5	103.74	CH	5.68	d (0.9)	7	4[b], 6, 7
6	153.22	C				
7	18.13	CH_3	2.06	d (0.7)	5	5, 6

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 17. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry 6-methyl-uracil

Atom	δ (^{13}C) ppm	QC ^{13}C	δ (^{1}H) ppm	QC ^{1}H
1 (NH)			12.29	4.31
2 (C=O)	175.89	182.69		
3 (NH)			12.29	5.53
4 (C=O)	161.08	164.64		
5	103.74	96.87	5.68	5.54
6	153.22	153.73		
7	18.13	16.61	2.06	2.35

Table 18. ^{1}H and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for **2,4-dithiouracil** [600.13 MHz (^{1}H) and 150.903 MHz (^{13}C)][a]

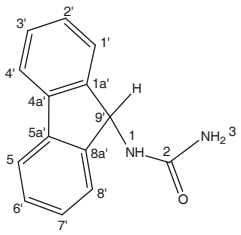
Atom	δ (^{13}C) ppm	DEPT-135	δ (^{1}H) ppm	Multiplicity (*J*, Hz)	^{1}H-^{1}H COSY	HMBC
1 (NH)			12.90	bs		
2 (C=S)	172.9	C				
3 (NH)			13.64	bs		
4 (C=S)	187.84	C				
5	117.19	CH	6.50	d (7.1)	6	2, 4, 5
6	136.72	CH	7.27	dd (7.7; 3.2)	5	4, 6

a) In DMSO-*d*6 solution. All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra. b) These correlations are weak. c) These correlations are extremely weak.

Table 19. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry 2,4-dithiouracil

Atom	δ(^{13}C) ppm	QC ^{13}C	δ(^{1}H) ppm	QC ^{1}H
1 (NH)			12.90	5.90
2 (C=S)	172.9	191.24		
3 (NH)			13.64	8.73
4 (C=S)	187.84	207.64		
5	117.19	114.21	6.50	6.62
6	136.72	137.24	7.27	6.73

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.



(9H-fluoren-9-yl)urea

Table 20. ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and ^{1}H-^{1}H COSY and HMBC correlations for (9*H*-fluoren-9-yl-)urea

Position	***δ* ^{13}C, ppm**	**DEPT-135**	***δ* ^{1}H, ppm**	**multiplicity, (*J*, Hz)**	**^{1}H-^{1}H COSY**	**HMBC**
1	-		6.52	d (8.7)	9’	
2	159.25	C	-			1,9’
3	-		5.64	s		
1’/ 8’	124.90	CH	7.54	d (7.4)	2’, 3’^{c},4’^{c}, 9’^{b}	2’^{c},3’,4’^{b},9’^{c}
2’/ 7’	127.59	CH	7.32	t (7.4)	1’, 3’,4’^{c}	3’^{c}, 4’
3’/ 6’	128.27	CH	7.40	t (7.4)	1’^{c}, 2’,4’	1’,2’^{c}
4’/ 5’	120.11	CH	7.83	d (7.5)	1’^{c},2’^{c} 3’	1’^{c},2’,3’^{b}
9’	55.16	CH	5.79	d (8.6)	1,1’^{b}	1,1’
1a’ / 8a’	145.88	C	-			2’,3’^{b},4’,9’
4a’ / 5a’	139.75	C	-			1’,2’^{b},3’,4’,9’^{b}

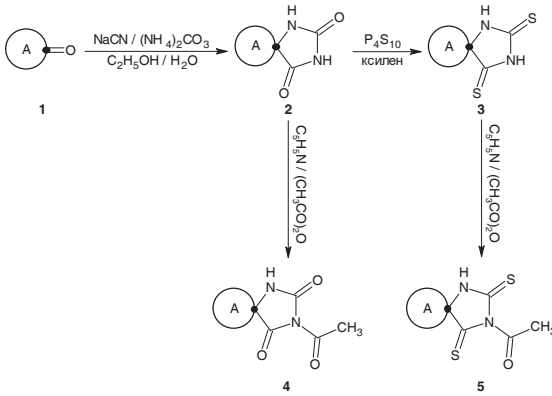
[a] DMSO-d_6 solvent, ^{1}H 600.13 MHz, δ_{ref} 2.50 ppm; ^{13}C 150.9 MHz, δ_{ref} 39.51 ppm; All these assignments were in agreement with COSY, HMQC and HMBC spectra; [b] These correlations are weak; [c] These correlations are very weak.

Table18. Comparison of experimental ^{1}H NMR and ^{13}C NMR spectral data and data obtained with Quantum chemistry

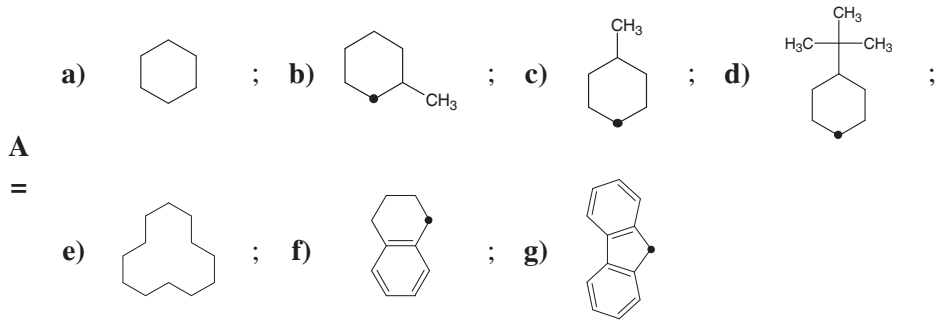
Position	exp. δ ^{13}C	QC δ ^{13}C	exp. δ ^{1}H	QC δ ^{1}H
1	-	-	6.52	2.04
2	159.25	155.53	-	-
3	-	-	5.64	2.31
1’/ 8’	124.90	134.39	7.54	8.20
2’/ 7’	127.59	132.06	7.32	7.62
3’/ 6’	128.27	135.59	7.40	7.81
4’/ 5’	120.11	123.19	7.83	8.20
9’	55.16	43.99	5.79	4.82
1a’ / 8a’	145.88	150.80	-	-
4a’ / 5a’	139.75	140.58	-	-

The geometry of the molecule was optimized on B3LYP (Becke three-parameter Lee–Yang–Parr) exchange-correlation functional with 6-31g (d) basis set and the NMR data obtained on HF (Hartree–Fock) exchange-correlation functional with 6-311+g (2d, p) basis set.

Работна задача: Синтез на ацетилни производни на спирохидантоини и техни дитиоаналози (схема 1).



Схема



Съединение	Систематично наименование
2a	1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
2b	6-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
2c	8-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
2d	8-*трет*-бутил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
2e	1,3-диазаспиро[4.11]хексадекан-2,4-дион
2f	3',4'-дихидро-2*H*,2'*H*,5*H*-спиро[имидазолидин-4,1'-нафтален]-2,5-дион
2g	спиро[флуорен-9,5'-имидазолидин]-2',4'-дион
3a	1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дитион
3b	6-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дитион
3c	8-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дитион
3d	8-*трет*-бутил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дитион
3e	1,3-диазаспиро[4.11]хексадекан-2,4-дитион
3f	3',4'-дихидро-2*H*,2'*H*,5*H*-спиро[имидазолидин-4,1'-нафтален]-2,5-дитион
3g	спиро[флуорен-9,5'-имидазолидин]-2',4'-дитион
4a	3-ацетил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
4b	3-ацетил-6-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
4c	3-ацетил-8-метил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
4d	3-ацетил-8-*трет*-бутил-1,3-диазаспиро[4.5]декан-2,4-дион
4e	3-ацетил-1,3-диазаспиро[4.11]хексадекан-2,4-дион
4f	1-ацетил-3',4'-дихидро-2*H*,2'*H*,5*H*-спиро[имидазолидин-4,1'-нафтален]-2,5-дион
4g	3'-ацетилспиро[флуорен-9,5'-имидазолидин]-2',4'-дион
5a	1-[2,4-бис(сулфанилиден)-1,3-диазаспиро[4.5]декан-3-ил]етан-1-он
5b	1-[6-метил-2,4-бис(сулфанилиден)-1,3-диазаспиро[4.5]декан-3-ил]етан-1-он
5c	1-[8-метил-2,4-бис(сулфанилиден)-1,3-диазаспиро[4.5]декан-3-ил]етан-1-он
5d	1-[8-*трет*-бутил-2,4-бис(сулфанилиден)-1,3-диазаспиро[4.5]декан-3-ил]етан-1-он
5e	1-[2,4-бис(сулфанилиден)-1,3-диазаспиро[4.11]хексадекан-3-ил]етан-1-он
5f	1-[2,5-бис(сулфанилиден)-3',4'-дихидро-1*H*,2'*H*-спиро[имидазолидин-4,1'-нафтален]-1-ил]етан-1-он
5g	1-(2',5'-дитиоксоспиро[флуорен-9,4'-имидазолидин]-1'-ил)етанон

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”, проведен на 16.03.2018 г., бе разгледан отчетът на редовен докторант ***Нора Георгиева Сотирова за първата година от докторантурата ѝ***. Научният ръководител доц. д-р Виолета Стефанова запозна членовете на катедрата със становището си и предложи оценка за първата година на докторантурата Много Добър (5). 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 Нора Георгиева Сотирова с оценка Много Добър (5).

Прилагам:

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

16.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 16.03.2018

ПРОТОКОЛ №5

На 16.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11
Присъстват 11
Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:
1. Годишни отчети на докторантите в катедрата
2. Учебни въпроси
3. Кадрови въпроси
4. Текущи въпроси

По точка 1.2 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Нора Георгиева Сотирова за първата година от редовната й докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Много добър (5).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Нора Георгиева Сотирова за първата година от редовната й докторантура с оценка Много добър (5).

16.03.2017 Протоколчик:
/П. Балабанова/

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

С Т А Н О В И Щ Е

за изпълнението на индивидуалния учебен план на ***Нора Георгиева Сотирова*** докторант на самостоятелна подготовка, 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: **"Методи за определяне на следови елементи в тежки матрици от металургичните производства"**

от

доцент доц. д-р. Виолета Миленкова Стефанова

научен ръководител на докторанта

Нора Сотирова бе зачислена като докторант на самостоятелна подготовка към катедрата по Аналитична химия и компютърна химия (КАХКХ) на Химическия факултет при Пловдивския университет „Паисий Хилендарски" със заповед на Ректора № Р33-672 от 16.02.2017 година, със срок на обучение в докторантурата 3 години.

През първата година от докторантурата си тя работи интензивно върху развиване на темата на дисертационния си труд.

Събрана е литература, насочена към проблематиката на дисертационния труд. В контекста на съвременните тенденции в развитието на аналитичните изследвания е мотивирана актуалността на темата на дисертационния труд, която предстои да бъде критично разгледана и систематизирана.

За съжаление не мога да не отбележа, че работата литературния обзор на дисертационния труд изостава и през втората година една усилията на докторанта трябва да бъдат ориентирани към систематично проучване, осмисляне и описване на публикуваните постижения в научната периодика.

Проучен бе общият микроелементен състав на 4 вида материали от цинково производство (цинкови и оловни кекове и велц окиси) чрез панорамен полуколичествен анализ с ICP-MS. На базата на получените резултати бяха определени целевите аналити, към които да се ориентира експерименталната работа.

Превид очакваните проблеми, произтичащи от сложния и непостоянен състав на реалните матрици е извършена сравнителна оценка на степента на извличане на целевите елементи посредством използване на две киселинни смеси (Царска вода и смес на Лунге) в комбинация с начина на внасяне на енергия в системата.

Оценени са и рисковете от загуба на летливи хлориди на арсен и антимон при използване на различни киселинни смеси и провеждане на процедурата на разтваряне в отворени или затворени съдове.

Започна методично изследване на неспектралните матрични ефекти, което ще продължи в посока на търсене на подходящи корекционни стратегии и методи за разделяне и концентриране на изследваните микроелементи.

През отчетния период докторант Сотирова проведе 40 часа упражнения по „Аналитична химия с инструментални методи" със студенти задочно обучение I курс, II семестър, специалности „Екология и ООС" и „Биология".

В заключение считам, че експерименталната работа по дисертацията е извършена прецизно. Получените резултати са оформени и добре и следващите стъпки на изследването са ясно очертани. Дейностите, включени в индивидуалния план на докторанта за първата година са завършени. Предлагам на Катедрения съвет на КАХКХ и Факултетния съвет на Химическия факултет при ПУ „Паисий Хилендарски" да приеме отчета за първата година от докторантурата на Нора Сотирова с оценка много добър 5 и препоръка да се интензифицира работата по прегледа и систематизирането на научната периодика.

13. 03.2018

Научен ръководител:
доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ “ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”

ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

Г О Д И Ш Е Н О Т Ч Е Т

от Нора Георгиева Сотирова

редовен докторант при Химически факултет,

катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

за периода март 2017 - март 2018

тема: ***„Методи за определяне на следови елементи в тежки матрици от металургичните производства”***

I **Учебна дейност**

1. Присъствие на семинар с международно участие, организирано от АСМ2 и Химическия факултет на тема: „ Приложения на съвременните аналитични техники в областта на клиничната химия, токсикологията и околната среда “.

2. Присъствие на семинар с международно участие, организиран съвместно от Химическия факултет на Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски“ и фирма T.R.A.M. ООД на тема: „ Приложение на масспектралните техники при определянето на биоактивни вещества “.

II. Преподавателска дейност

1. Провеждане на упражнения по Аналитична химия със студенти задочно обучение I курс, II семестър, специалност „Екология и ООС“ и „Биология“.

III. Работа по дисертацията

Експерименталната част от дисертацията започна с идентифициране на микроелементите в четири различни проби от цинково производство. Направен е полуколичествен анализ с квадруполен масспектрометър с индуктивно свързана плазма ICP-MS Agilent 7700 (Tokyo, Japan). Резултатите са представени в таблица 1.

Елемент [g/t]		Проба 1	Проба 2	Проба 3	Проба 4
As	[g/t]	2016	1089	3192	2267
Sn	[g/t]	6866	1607	583	3801
Sb	[g/t]	2477	726	722	1653
In	[g/t]	3168	948	287	1906
Bi	[g/t]	529	529	251	940
Ti	[g/t]	365	140	387	314
Te	[g/t]	150	88	32	218
La	[g/t]	8	3	6	10
V	[g/t]	35	18	21	24
Ge	[g/t]	6	4	24	4
Se	[g/t]	17	47	8	33
Y	[g/t]	4	2	3	4
Zr	[g/t]	31	14	6	26
Ce	[g/t]	12	6	11	19
Mo	[g/t]	22	8	27	12
Nd	[g/t]	5	3	5	8
W	[g/t]	13	9	9	14
Sc	[g/t]	1,5	1,8	3,0	1,2
Hg	[g/t]	1	2	1	5
Rh	[g/t]	1,2	0,8	0,9	0,5
Pd	[g/t]	1,4	0,3	1,8	1,7
Nb	[g/t]	0,7	0,9	0,7	1,0
Pr	[g/t]	1	1	1	2
Sm	[g/t]	1	0,5	1	2
Eu	[g/t]	0,4	0,1	0,3	0,4
Gd	[g/t]	1,6	0,6	1,2	2,2
Tb	[g/t]	0,2	0,1	0,1	0,3
Dy	[g/t]	1,4	0,5	0,9	1,6
Hf	[g/t]	1,3	0,6	0,3	1,3
Au	[g/t]	0,1	0,1	0,8	0,1
Th	[g/t]	1,0	0,6	0,8	1,4
U	[g/t]	0,4	0,4	0,5	0,7

Таблица 1 Резултати от полуколичествен анализ за идентифициране на микроелементи в различни проби от цинково производство

Извършеното проучване показа, че в образците от изследваните материали от металургичното производство се съдържат елементите As, Sb, Sn, Bi и In в интервала от няколко стотин до няколко хиляди грама на тон.

Значително по-ниски концентрации са установени за Ti (между 140 и 400 g/t) и Te(между 32 и 218 g/t).
На нива между 2-200 g/t се откриват V, Se, Zr, La, Ce и Mo. Останалите елементи са на суб-следови нива (<2-5 g/t).
Това проучване позволи да се очертаят целевите елементи, които влизат в първата дефинирана група и представляват интерес за разработване на методи за анализ и контрол на съпътстващите елементи в суровини и материали от металургичното производство.
На база получените резултати от полуколичествените анализи е направена литературна справка, която обхваща различни методики за разтваряне на пробите, както и съвременните насоки в развитието на методите за определяне на елементи от тежки матрици.
Първият етап от проучването бе насочен към елементите As, Sb и In. Задачата, която си поставихме е да намерим подходяща методика за разтваряне на пробите, която осигурява надеждното им извличане от сложните по състав матрици. Изследвани са два основни подхода за разтваряне: класическо разлагане в киселинна смес на термична плоча и миктовълново разтваряне в затворени съдове. Варирани са киселинните смеси с участие на силно-окисляващи реактиви и добавяне на флуороводородна киселина за атакуване на силикати от матрицата.
За определяне концентрацията на As, Sb и In в четири вида материали, са проведени изследвания с ICP-OES Thermo Scientific iCAP 6300. За всеки елеменет са използвани по две от най-чувствителните линии. За As атомните 189,042nm и 193,759nm, за Sb атомните- 206,833nm и 217,581nm, за In йонна-230,606nm и атомна 451,131nm. Измерванията са направени при аксиална конфигурация на плазмената горелка.
Материалите са разтворени на термична плоча (в отворени съдове при атмосферно налягане) и в микровълнова система (в затворени съдове при високо налягане), при еднакви условия с две различни киселинни смеси- Царска вода (AR) и смес на Лунге. Резултатите са представени в таблица 2.

Zn Tefsa AR conv				**Zn Tefsa Лунге conv**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		*Axial [nm]*	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	3,49	1,7		*As 189.042*	3,37	1,1
As 193.759	3,44	1,9		*As 193.759*	3,31	1,2
Sb 206.833	0,62	2,2		*Sb 206.833*	0,60	1,3
Sb 217.581	0,60	2,2		*Sb 217.581*	0,57	0,8
In 230.606	0,48	3,0		*In 230.606*	0,50	0,9
In 451.131	0,20	45		*In 451.131*	0,27	11

Zn Tefsa AR mw				**Zn Tefsa Лунге mw**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		*Axial [nm]*	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	3,65	0,4		*As 189.042*	3,55	1,5
As 193.759	3,61	0,3		*As 193.759*	3,50	1,7
Sb 206.833	0,65	0,2		*Sb 206.833*	0,64	1,8
Sb 217.581	0,62	0,3		*Sb 217.581*	0,61	1,8
In 230.606	0,46	0,5		*In 230.606*	0,49	2,8
In 451.131	0,07	53		*In 451.131*	0,11	39
Pb кек AR conv				**Pb кек Лунге conv**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		*Axial [nm]*	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	2,99	1,4		*As 189.042*	2,88	1,2
As 193.759	2,94	1,2		*As 193.759*	2,83	1,3
Sb 206.833	3,20	1,3		*Sb 206.833*	3,03	1,5
Sb 217.581	3,20	1,5		*Sb 217.581*	3,03	1,7
In 230.606	2,58	0,4		*In 230.606*	2,56	0,5
In 451.131	2,59	1,3		*In 451.131*	2,68	0,7
Pb кек AR mw				**Pb кек Лунге mw**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		*Axial [nm]*	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	2,86	0,3		*As 189.042*	2,88	0,8
As 193.759	2,82	0,6		*As 193.759*	2,84	0,8
Sb 206.833	3,22	0,6		*Sb 206.833*	3,23	0,8
Sb 217.581	3,20	0,6		*Sb 217.581*	3,20	0,8
In 230.606	2,53	0,1		*In 230.606*	2,56	0,3
In 451.131	2,60	1,1		*In 451.131*	2,63	0,9
Pb кек ППП AR conv				**Pb кек ППП Лунге conv**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	0,48	1,7		*As 189.042*	0,45	1,6

As 193.759	0,47	2,6		*As 193.759*	0,44	1,7
Sb 206.833	0,74	2,3		*Sb 206.833*	0,68	1,6
Sb 217.581	0,72	2,2		*Sb 217.581*	0,66	1,7
In 230.606	0,18	11,0		*In 230.606*	0,22	5,6
In 451.131	0,17	3,4		*In 451.131*	0,24	15,8
Pb кек ППИ AR mw				**Pb кек ППИ Лунге mw**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	0,47	1,4		*As 189.042*	0,45	0,9
As 193.759	0,46	0,9		*As 193.759*	0,44	0,7
Sb 206.833	0,72	0,7		*Sb 206.833*	0,71	0,6
Sb 217.581	0,70	1,0		*Sb 217.581*	0,66	0,7
In 230.606	0,26	3,6		*In 230.606*	0,27	2,1
In 451.131	0,22	18,0		*In 451.131*	0,24	9,6
ВО преди AR con				**ВО преди Лунге con**		
Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %		Axial [nm]	Cc [ppm]	RSD %
As 189.042	1,20	1,0		*As 189.042*	1,16	0,8
As 193.759	1,19	1,2		*As 193.759*	1,14	0,7
Sb 206.833	0,60	1,3		*Sb 206.833*	0,57	1,0
Sb 217.581	0,59	1,2		*Sb 217.581*	0,57	0,9
In 230.606	0,61	1,6		*In 230.606*	0,66	0,4
In 451.131	0,48	5,5		*In 451.131*	0,65	3,3

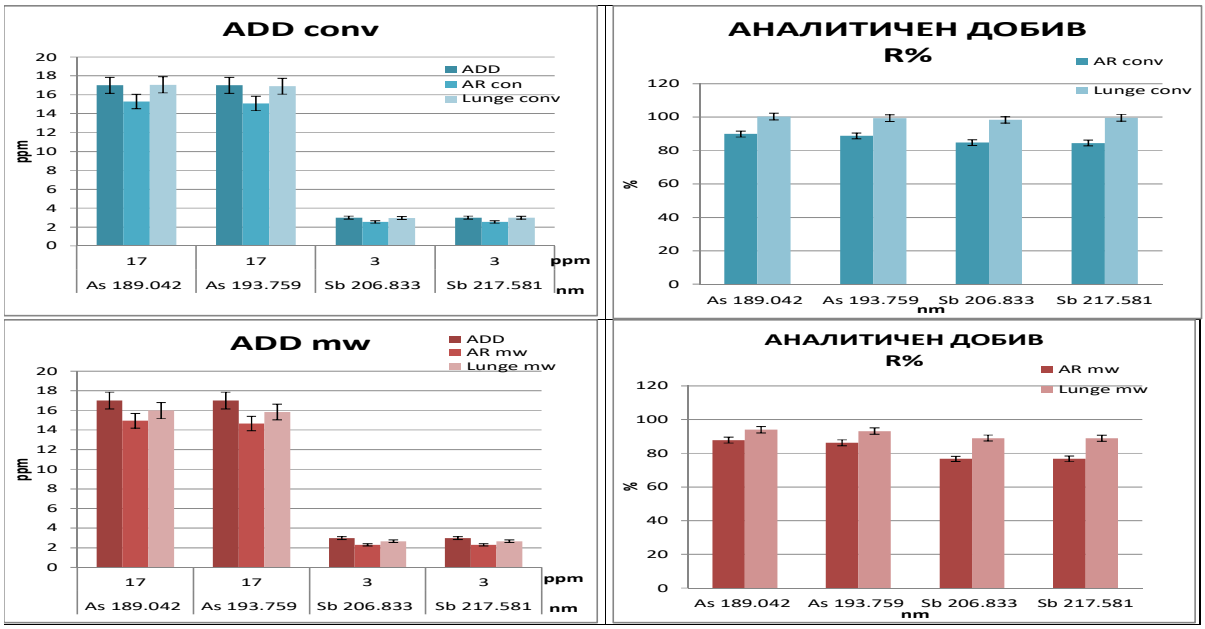
Таблица 2. Определени концентрации на As, Sb, In при DF=1000 за четирите типа материали при конвенционално и микровълново разлагане с двете киселинни смеси.

От анализът на получените резултати може да се заключи, че при тези експерименталните условия няма разлика в извличането на аналитите при конвенционално и микровълново разлагане, както и от избора на киселинна смес.

Няма спектрално пречене за As и Sb във всички матрици. При ниски концентрации на In линията на 451nm не е достатъчно чувствителна.
Разликата в измерените концентрации на двете линии In (451nm и 230nm) може да е индикация и за спектрално пречене при 230nm, но трябва да се изследва допълнително.
В сместа на Лунге са отчетени малко по-ниски концентрации, което може да се дължи на матрично подтискане, което бе следващата стъпка на изследването.
При микровълновото разтваряне, измерените концентрации са леко завишени, затова трябва да се проучи дали конвенционалното разтваряне в отворени съдове води до загуби вследствие на образуване на летливи хлориди на арсен и антимон в цинковия кек.
На този етап не се доказва значителна разлика в степента на извличане на трите елемента с царска вода и смес на Лунге.
Като следващ етап от експериментите е оценяването на риска от загуба на летливи съединения на аналитите. Проведени са паралелни разтваряния, като към пробите предварително се добавят стандартни разтвори на елементите, а концентрациите на стандартните добавки за As и Sb е съизмерима с тази в анализираните вече проби. Това изследване дава възможност да се оценят загубите на аналити в процеса на разтваряне в зависимост от няколко фактора:

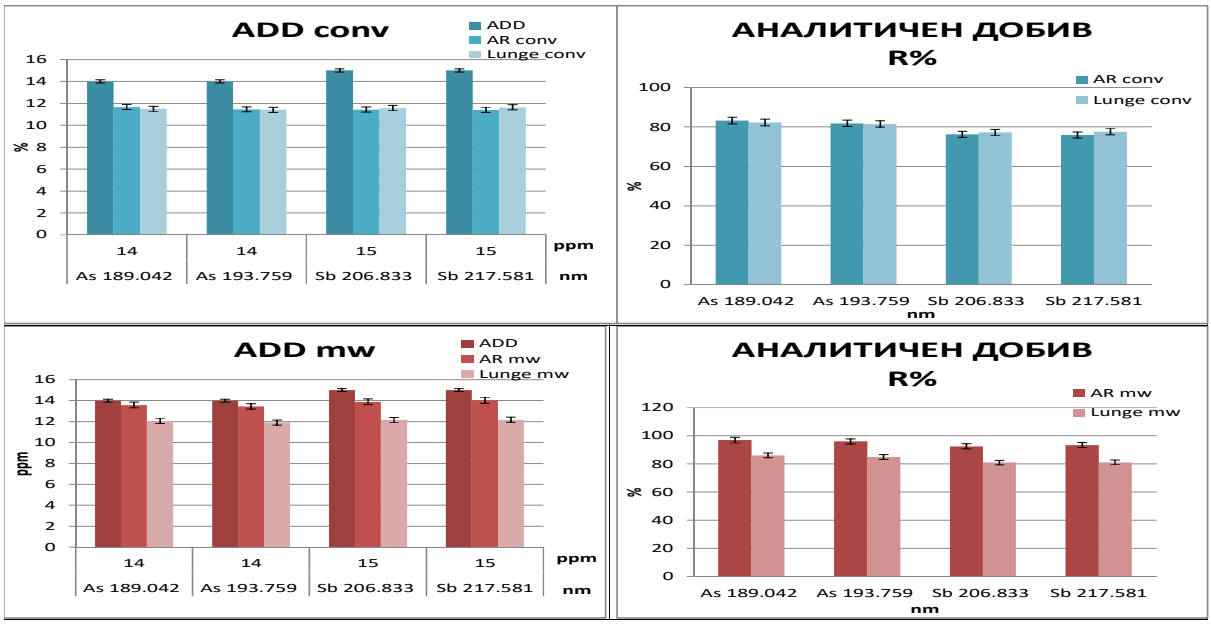
- ✓ начина за внасяне на енергия в системата (конвенционално загряване на термична плоча или микровълнова система);
- ✓ подхода на разтваряне (в отворени съдове при атмосферно налягане или затворени съдове при повишено налягате);
- ✓ използваната киселинна смес (AR или смес на Лунге);

За материалът Zn кек не е установена загуба на As и Sb при разлагането със сместа Лунге. По този начин се получава по-голям аналитичен добив за елементите As и Sb. При разтварянето на елементът As се установи, че начина за внасяне на енергия в системата не оказва влияние върху ефективността на извличането му. За елементът Sb резултатите от микровълновото разлагане са по-ниски, от тези получени при разтваряне на термична плоча. Резултатите са представени на фирура 1.



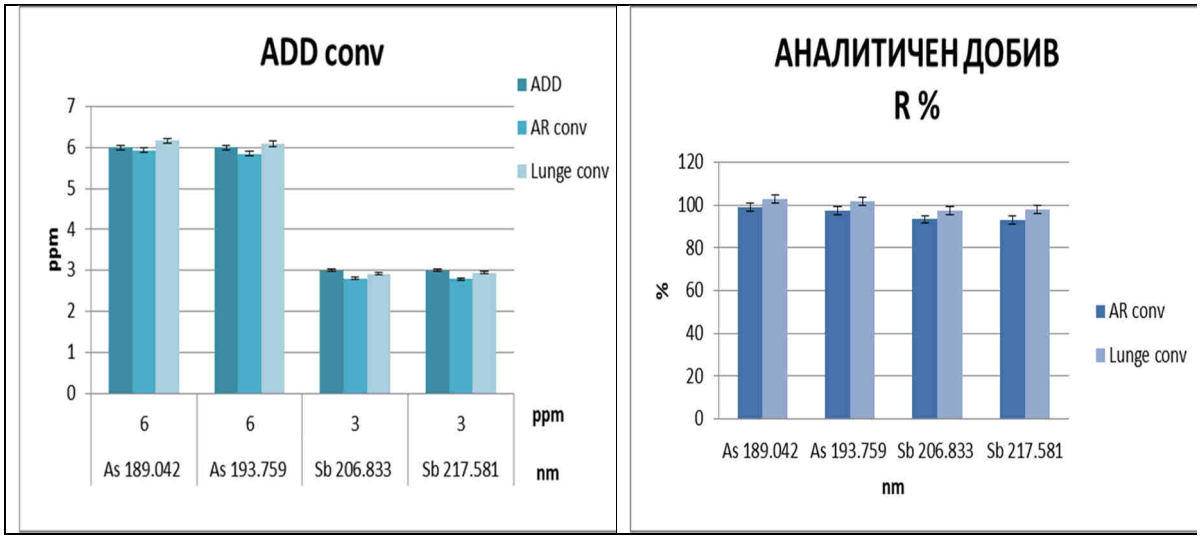
Фигура 1. Стандартни добавки на As и Sb преди конвенционално и микровълново разлагане с две киселинни смеси и съответният аналитичен добив за материала Zn кек.

Вторият анализиран материал е Pb кек. При конвенционалното разлагане резултатите за елементите As и Sb, получени при двете алтернативни киселинни смеси (смес на Лунге и Царска вода AR) са съпоставими. И в двата случая получените резултати показват занижени стойности на стандартните добавките. За разлагането в затворен съд поставен в микровълнова система , по-голям аналитичен добив е постигнат със сместа AR. В следствие на направените изследвания се установи,че за тази матрица начина за внасяне на енергия в системата оказва влияние върху ефективността на разтварянето. По-висок аналитичен добив се постига при микровълновото разлагане.



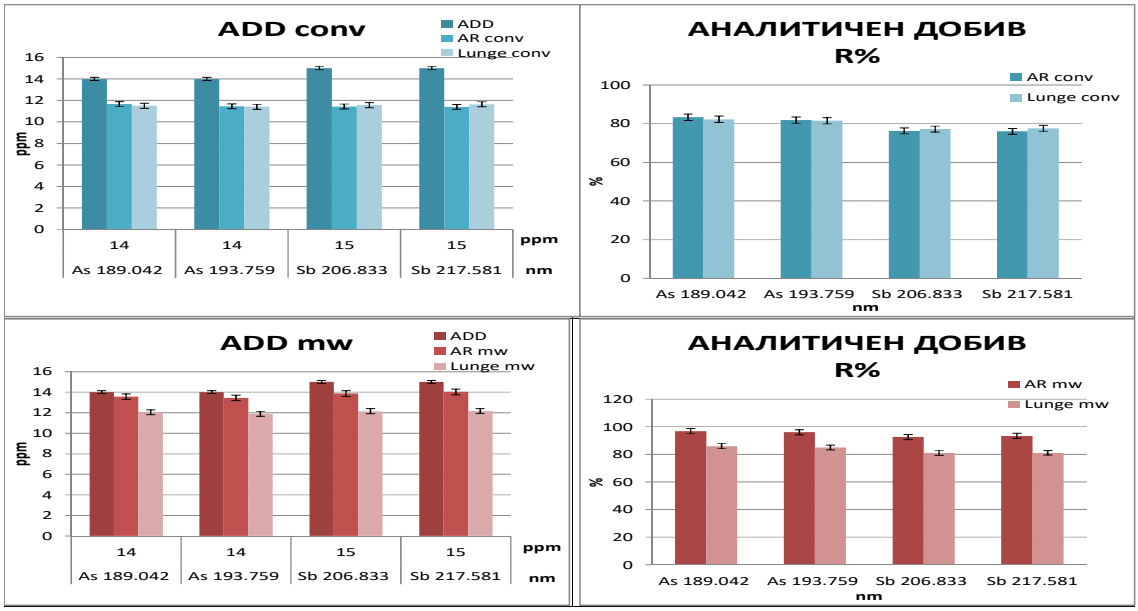
Фигура 2. Стандартни добавки на As, Sb преди конвенционално и микровълново разлагане с две киселинни смеси и съответният аналитичен добив за материала Pb кек .

За материалът „Велц окиси преди пържене“ е получен по-голям аналитичен добив за елементите As и Sb със сместа на Лунге. Резултатите при анализа на стандартните добавките преди разлагане са статистически неразличими за елементите As и Sb, от което може да се предположи, че няма загуби при разтварянето в отворени съдове.



Фигура 3. Стандартни добавки на As, Sb и In във „Велц окиси преди пържене“ и аналитичен добив при конвенционално разлагане с две киселинни смеси.

При материалът „Pb кек ПППИ“ по-добри резултати за всички елементи са постигнати с киселинна смес AR. Стандартните добавки за As и Sb са статистически неразличими, както при термична плоча, така и при микровълновото разтваряне. При анализирането на Sb се установи, че конвенционалното разлагане дава по-висок аналитичен добив от микровълнотото с около 10% за сместа AR и около 20% за Лунге сместа. Резултатите са представени на фирура 4.



Фигура 4. Стандартни добавки на As, Sb преди конвенционално и микровълново разлагане с две киселинни смеси и съответният аналитичен добив за материала Pb кек ПППИ.

Проведените изследвания показват, че за тези експериментални условия са постигнати минимални разлики в степента на извличане на елементите As и Sb при разтваряне на термична плоча и в микровълнова система. За да се определи еднозначно дали има малки загуби при третиране на пробите в отворени съдове и конвенционално разтваряне, следващата стъпка на изследването бе да оценим матричния ефект на използваната киселинна смес и начина на внасяне на енергия в системата.

Експериментът за изследване на матричният ефект за елементите As, Sb, In , предизвикан от използваната киселинна смес и начина на третиране е проведен с ICP-OES Thermo Scientific iCAP 6300 за две от най-чувствителните линии за всеки елемент, които са представени в таблица 3.

Елемент	**nm**	**E [eV]**
As	189.042	6,56
As	197.759	6,40
Sb	206.833	5,98
Sb	217.581	6.69
In	230.606	5.37
In	451.131	3.02

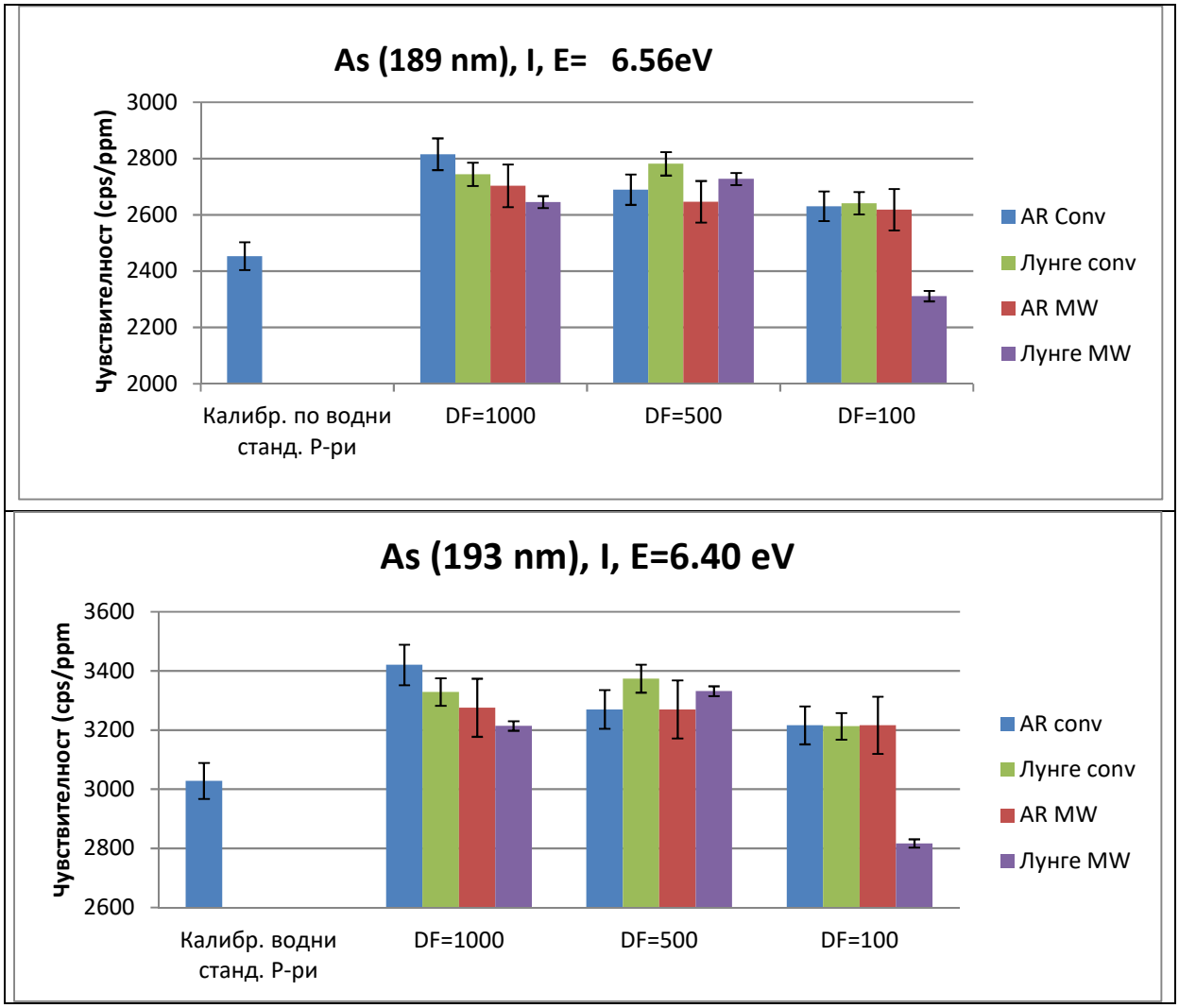
Таблица 3 Емисионни линии на As, Sb и In и енергии им

За построяване на калибрационните криви са приготвени по три стандартни разтвора с концентрации представени в таблица 4:

Стандарт №	**As [ppm]**	**Sb [ppm]**	**In [ppm]**	**HNO3** [% v/v]
0	0	0	0	2
1	0.5	0.5	0.5	2
2	1	1	1	2

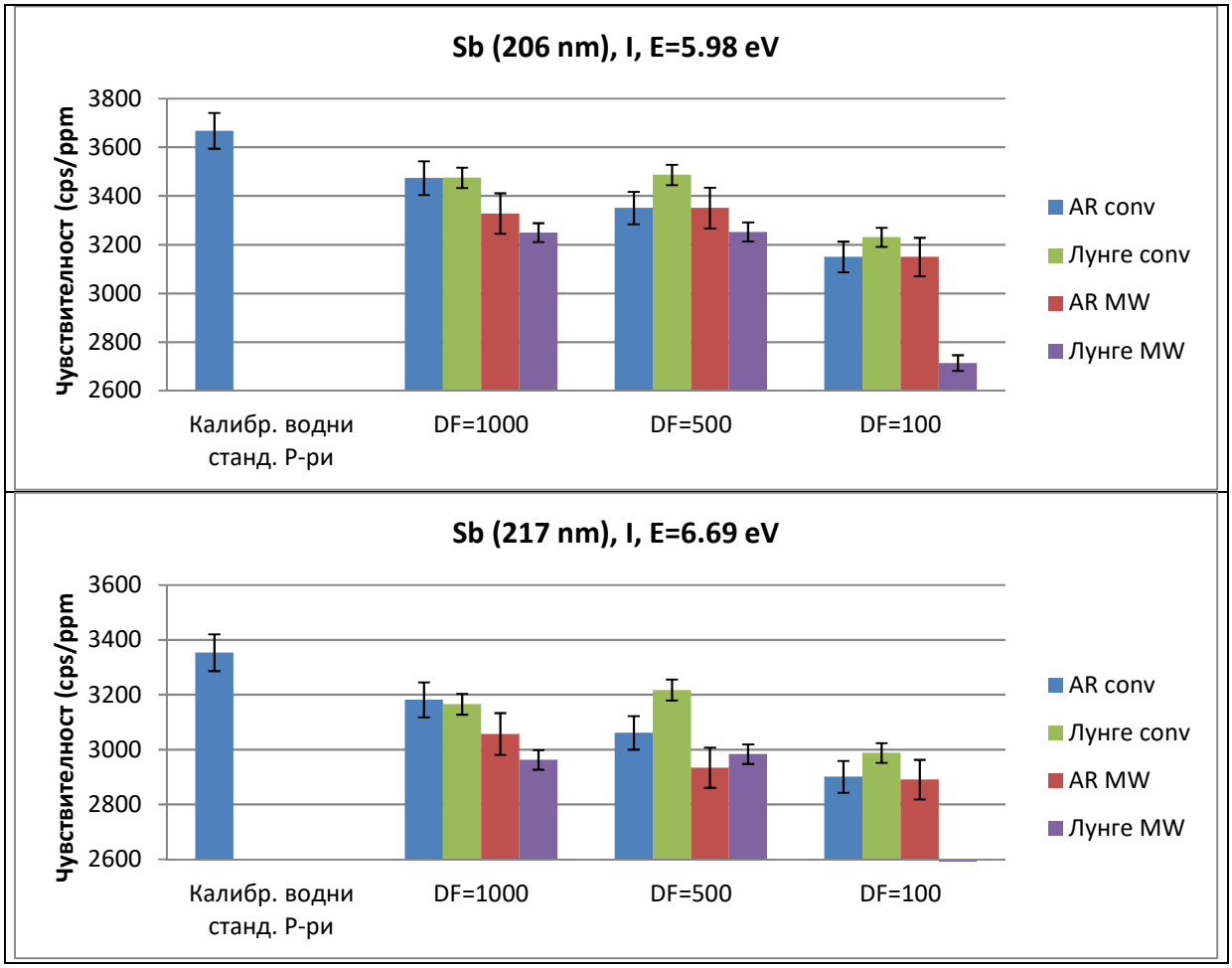
Таблица 4 Крайни концентрации на калибрационни стандартни разтвори

Направени са матрични стандарти, за които са използвани празните проби на двете киселинни смеси (AR и Лунге), при различните подходи за третиране – конвенционално и микровълново, но с различни фактори на разреждане- 100, 500 и 1000. Направено е сравнение на калибрациите по водни стандарти и в празна проба. Резултатите са представени на графики 1; 2 и 3.



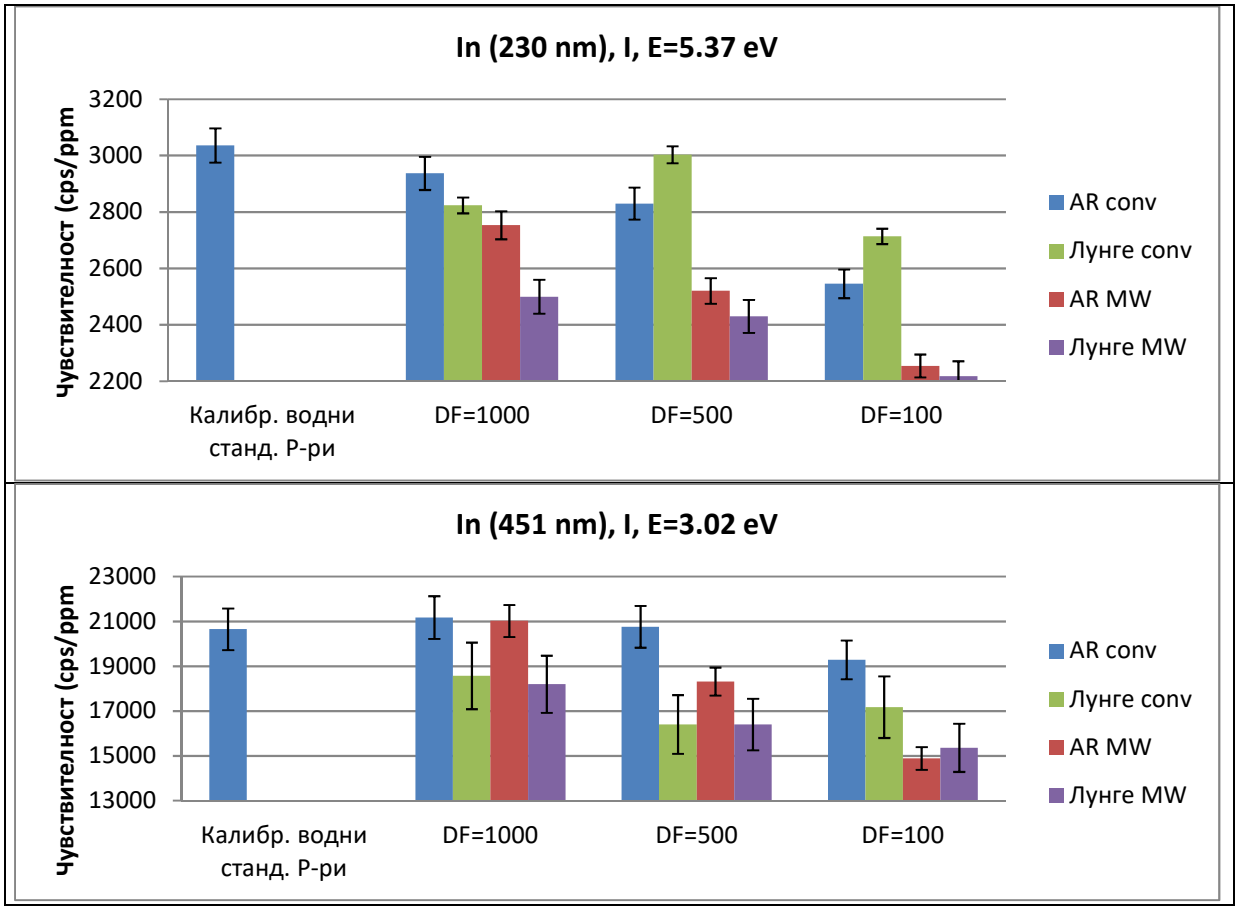
Графика 1 Сравнение на калибрациите за As по водни стандарти и в празна проба с различни фактори на разреждане

Двете атомни линии на арсен, които са с почти еднакви потенциали на възбуждане се държат аналогично. Наблюдава се повишаване на сигналите в присъствие на киселинната матрица. При увеличаване фактора на разреждане, чувствителността нараства. За най-високият фактор на разреждане се забелязва ясна градация в реда AR conv>Lunge conv>AR MW>Lunge MW. Матричният ефект от киселините се изравнява при най-ниския фактор на разреждане, но чувстителностите остават все още по-високи от калибрация по водни стандартни разтвори, с изключение на Lunge MW, където е наблюдавано потискане. Установено бе, че присъствието на киселинната смес води до повишаване на фоновото излъчване на плазмата и при двете арсенови линии. Положителният матричен ефект е необичаен и ще бъде допълнително изследван.



Графика 2 Сравнение на калибрациите за Sb по водни стандарти и в празна проба с различни фактори на разреждане

При двете линии на Sb се наблюдава подтискане, което намалява с увеличаване на разреждането. Матричният ефект за двете наблюдавани линии е различен. Линията с по-ниска енергия на възбуждане е по-слабо повлияна от киселинната матрица. Най-слабо влияние върху чувствителността се наблюдава при третиране в отворени съдове, защото там остатъчната концентрация на киселини намалява в резултат на изпарение. При микровълновото разтваряне в затворени съдове, където киселинното съдържание се запазва високо, ефекта на потискане е силен. При сместа на Лунге доминиращата азотна киселина, която е с по-висока плътност показва най-силен матричен ефект.



Графика 3 Сравнение на калибрациите за In по водни стандарти и в празна проба с различни фактори на разреждане

За меката атомна линия на Индий 451 nm, при конвенционално разтваряне с Царска вода не се наблюдава матричен ефект за фактори на разреждане 500 и 1000. Слабо изразено е и матричното потискане при 230 nm, което при фактор 500 е едва 6-7%. Единствено при ниският фактор влиянието на киселините е значимо. Отново се вижда, че ефекта на изпарение в отворени съдове облекчава матричното влияние.
От проведеният експеримент се установи градация в матричния ефект при различните комбинации:

- третирането в отворени съдове намалява остатъчното съдържание на киселини и облекчава матричния ефект;
- сместа на Лунге в комбинация с микровълнова система има най-силен матричен ефект;
- установено е нетипично повишаване на чувствителността за арсен, което трябва да бъде проверено още веднъж.
- С цел облекчаване на матричния ефект се препоръчва допълнително разреждане на разтворите поне до фактор 500, при което концентрациите на As и Sb остават на достатъчно високо ниво. Проблем за измерването поставя само ниското съдържание на In.
- Следва да се направи оценка на влиянието на разтворената пробна матрица върху аналитичните сигнали .

Изследване на неспектралният ефект, породен от матрични компоненти

За отчитане на матричното влияние на четирите матрици разтворани с киселинната смес Лунге, при конвенционално и микровълново разлагане са взети аликвоти, на които са направени стандартни добавки на As и Sb представени в таблица 5:

Материал	**As [ppm]**	**Sb [ppm]**
Zn kek Tefsa	2	0,5
Pb kek Tefsa	2	2
Pb kek ПППИ	0,5	0,5
ВО преди	1	0,5

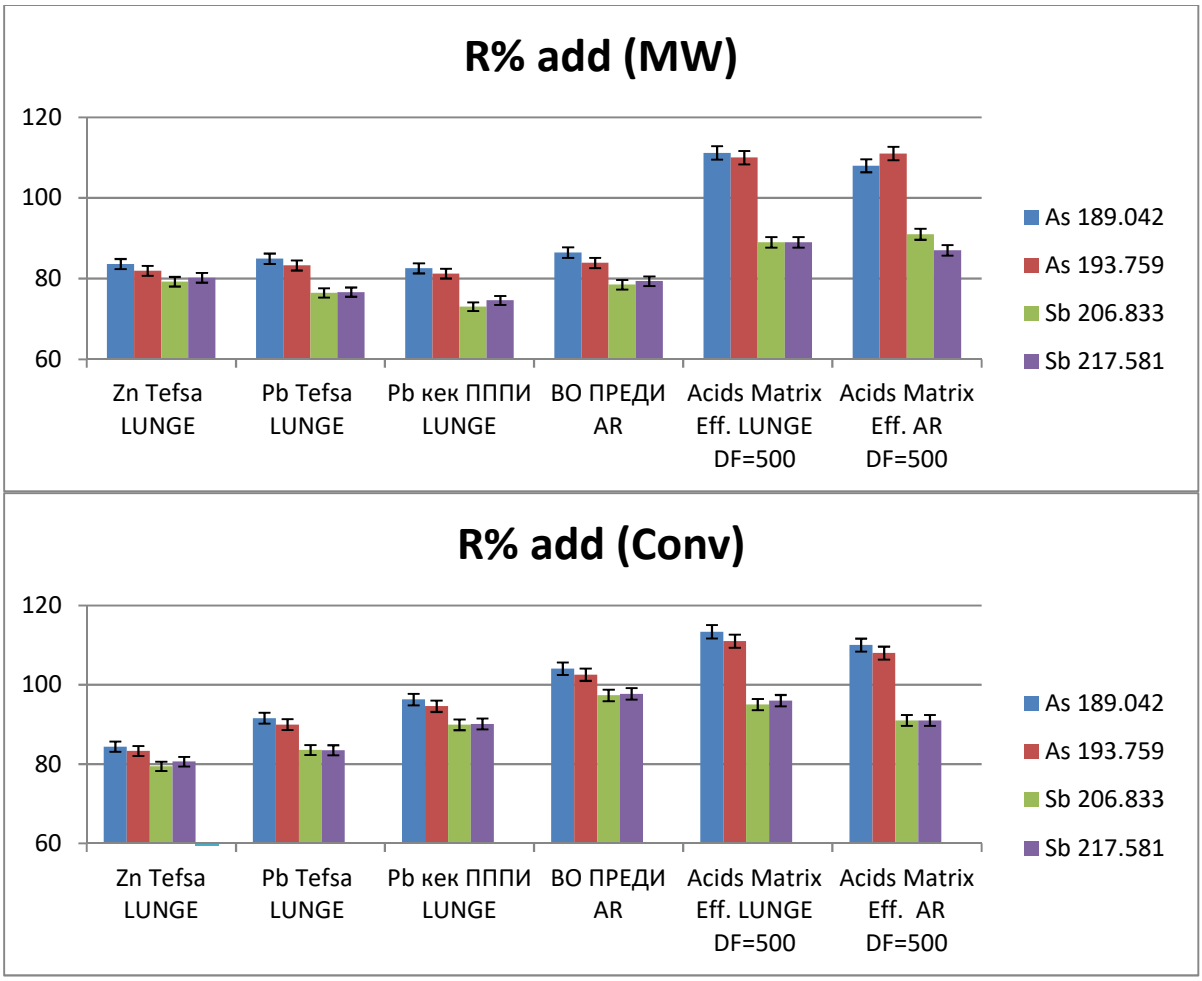
Таблица 5 Стандартни добавки на As и Sb

Пробите са измерени на четирите емисионни линии- As 189.042nm, As 193.759nm, Sb206.833nm, Sb 217.581nm. Резултатите от анализа на стандартните добавки са представени в таблица 5 и на графика 4.

Conv		***Измерени добавки***							
	Добавка	**As 189.042nm [ppm]**	**RSD %**	**As 193.759nm [ppm]**	**RSD %**	**Sb 206.833nm [ppm]**	**RSD %**	**Sb 217.581nm [ppm]**	**RSD %**
Zn Tefsa	As 2ppm; Sb0,5 ppm	1,69	1.6	1,67	1.6	0,4	1.8	0,4	1.8
Pb Tefsa	As 2ppm; Sb 2 ppm	1,83	1.3	1,8	1.3	1,67	1.9	1,67	1.9
Pb кек ПППИ	As 0,5 ppm; Sb 0,5ppm	0,48	3.5	0,47	3.5	0,45	2.4	0,45	2.4
ВО ПРЕДИ АR	As 1ppm; Sb 0,5 ppm	1,04	1.0	1,03	1.1	0,49	1.0	0,49	1.0

MW		*Измерени добавки*							
	Добавка	**As 189.042nm [ppm]**	**RSD %**	**As 193.759nm [ppm]**	**RSD %**	**Sb 206.833nm [ppm]**	**RSD %**	**Sb 217.581nm [ppm]**	**RSD %**
Zn Tefsa	As 2ppm; Sb 0,5 ppm	1,67	2.8	1,64	2.4	0,4	3.4	0,4	3.4
Pb Tefsa	As 2ppm; Sb 2 ppm	1,7	1.1	1,67	1.1	1,53	1.0	1,53	1.0
Pb кек ПППИ	As 0,5 ppm; Sb 0,5ppm	0,41	1.2	0,41	1.2	0,37	1.2	0,37	1.2
ВО ПРЕДИ АR	As 1ppm; Sb 0,5 ppm	0,86	2.3	0,84	2.3	0,39	3.6	0,4	3.6

Таблица 5 Результати от стандартните добавки



Графика 4 Резултати от стандартните добавки

От представените графики се вижда, че всички изследвани матрици проявяват допълнителен ефект на потискане върху аналитичните сигнали. При конвенционално разтваряне, където остатъчната концентрация на киселини е по-ниска, се наблюдава ясна градация в ефекта на разтворената пробна матрица. Най-слаб матричен ефект има при ВО. Той се засилва при оловните кекове, а най-силно е потискането от матрицата на цинковия кек. Във всички проби сигналите за двете арсенови линии са по-слабо повлияни от сигналите за антимон. Това е потвърждение на положителния ефект на киселините върху емисионните преходи на арсен. При микровълновото разтваряне, високото съдържание на остатъчни киселини донякъде нивелира матричния ефект в различните проби. И тук антимона е по-силно засегнат. Потискането достига ~30 % и трябва да се предприемат адекватни мерки за корекция.

Предстоящи експерименти:

* Допълнителни проучвания за установяване причините за положителния матричен ефект от използваната киселинна смес върху линиите на Арсен.
* Изследване на подходи за корекция на неспектралното матрично влияние
* Откриване на спектралните пречения, поради факта, че анализираните проби имат разнообразен състав и много високо съдържание на цинк, желязо и манган, което от своя страна може да причини припокриване на спектралните линии на аналитите от съпътстващите компоненти в матрицата. Особено внимание следва да се отдели на Индий.
* Предстои проучване на поведението на Sn и Bi в матриците от цинково производство

15.03.2017 г. Докторант:.....

гр. Пловдив /Нора Сотирова/

Научен ръководител:.....

/доц. д-р Виолета Стефанова/

Ръководител катедра:.....

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

ДО ДЕКАНА НА
ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ
ПУ "П.ХИЛЕНДАРСКИ"
ТУК

ДОКЛАД

от доц. д-р Георги Патронов,
ВрИД ръководител катедра "Химична технология"

Г-Н ДЕКАН,

На заседание на Катедрения съвет на катедра „Химична технология", проведено на 14 март 2018г. редовен докторант Благо Спасов Чучков изложи своя отчет за първата година от обучението си. Научният ръководител проф. д-р Г. Антова представи становище за дейността на докторанта и предложи много добра оценка.

Катедреният съвет обсъди и прие единодушно отчета и оценката на докторант Чучков.

Моля Факултетния съвет да приеме отчета на редовен докторант Благо Спасов Чучков и предложената много добра оценка за неговата дейност през първата година на обучение.

Прилагам препис-извлечение от протокола от катедрения съвет, отчета на докторанта и становището на научния ръководител.

16.03.2018 г.

ВрИД ръководител катедра:
/доц. д-р Георги Патронов/

Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"
Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 115

от катедрено съвещание

Препис

Днес 14.03.2018 год. се състоя съвещание на кат. Химична технология.

Присъстваха: проф. д-р Г. Антова, доц. д-р Г. Патронов, гл. ас. д-р Ж. Петкова, гл. ас. д-р И. Костова, ас. П. Янев, докт. Б. Чучков, хим. Ж. Симеонова.

Отсъстваха: доц. д-р М. Ангелова-Ромова – в отпуск по болест, доц. д-р Д. Тончев – в неплатен отпуск, гл. ас. д-р О. Тенева – в отпуск по майчинство.

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Учебни въпроси

Разглеждане отчета на редовния докторант Благо Спасов Чучков (към секция ОХТ) по докторска програма "Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати".

Докторантът представи своя отчет за първата година.

Ръководителят проф. д-р Г. Антова, представи становище за дейността на Благо Чучков през първата година от докторантурата му.

Членовете на катедрения съвет приеха отчета за първата година от докторантурата (01.03.2017 – 28.02.2018 г.) на Благо Чучков.

Оценката на докторанта след гласуване на членовете на катедрения съвет е: Мн. добър (5).

Протоколирал:
(хим. Ж. Симеонова)

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

Годишен отчет

за първата година от работната програма

на Благо Спасов Чучков,

редовен докторант в катедра „Химична технология”

по докторска програма: „Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати”

Тема на дисертационния труд: „Състав на остатъчни липидни продукти и влиянието им върху процеса на обработка на културална течност при получаване на антибиотика Salinomycin (Салиномицин)

Г-н Декан,

Представям информация относно изпълнението на задачите по индивидуалния ми план за първата година от докторантурата (за периода 01.03.17 – 28.02.2018г.).

Отчетът е съобразно изготвения план-програма за работата през първата година.

Изпълнени задачи:

I. Учебна работа и педагогическа дейност

1. Обучаване на студенти стажанти от специалност Медицинска химия, IV курс, провеждащи практиката си в „Биовет” АД, гр. Пещера в периода 01.03.2017-31.05.2017 г. по следната тема:

„Определяне на концентрацията на активната субстанция в лекарствени продукти чрез високо ефективна течна хроматография(HPLC)”.

2. Провеждане на упражнения по органична химична технология (ОХТ) със студенти от специалност „Химия‘‘, IV курс, задочно обучение – 30 часа.
3. Провеждане на производствена практика по ОХТ със студенти от специалност „Химия”, IV курс, задочно обучение – посещение на производствената база и лабораторията за контрол на качество в предприятието за производство на лекарствени препарати и хранителни добавки за ветеринарната медицина, Биовет АД, гр. Пещера – 10 часа.
4. Подготовка за докторантския минимум, който беше успешно положен на 9.03.2018 г.

II. Участие в проекти, семинари и конференции

- Участие в колектива на факултетния проект (ФП17 ХФ-013) "Създаване на нови материали и технологии и изследване приложението им в сферата на здравеопазването, фармацевтичната промишленост и околната среда" към работна група Органична химична технология.
- Участие в Национална научна конференция „Образование и наука-за личностно и обществено развитие‘‘, ПУ „П. Хилендарски‘‘, Филиал - Смолян, 2017 г., гр. Смолян (27.10.17-28.10.2017г.).
- Участие като съавтор в публикация:
  Петкова Ж., М Ангелова-Ромова, ***Б. Чучков***, „Мастнокиселинен състав и липидни индекси на масло от семена на амарант (Amaranthus caudatus L.)“, Сборник с научни доклади от Национална научна конференция „Образование и наука-за личностно и обществено развитие‘‘, ПУ „П. Хилендарски‘‘, Филиал- Смолян, 2017, стр. 96-106‘.
- Посещение на лекциите, изнесени на семинара „Приложения на съвременни аналитични техники в областта на клиничната химия, токсикологията и околната среда" - Фирма ACM2, Thermo Fisher Scientific и Химически факултет на ПУ "Паисий Хилендарски", Пловдив, 14.06.2017 г.

III. Работа, извършена по дисертационния труд

1. Направена е справка относно състава на хранителната среда необходима за развитието на щама Streptomyces (салиномицин) – химичен състав на маслата, (рапично и соево) и влиянието на свойствата им върху ферментационния процес и получавания краен продукт.
2. Запознаване с параметрите, при които се провежда ферментационния процес и процеса на изсушаване на крайния продукт.
3. Направени са изводи от литературната справка, въз основа на които са формулирани целите и основните задачи на изследванията.
4. Осигурени са проби от маслата (соево и рапично), които се използват при ферментацията на щама Streptomyces (салиномицин).
5. Взета е проба от крайния продукт (Sacox-търговско наименование) получена след ферментация на салиномицина.

IV. Експериментална работа

1. Запознане и овладяване на методите за изследване на липиди, като е усвоена и техниката на работа за анализ на липиди чрез тънкослойна хроматография.
2. Определени са физикохимичните показатели на соевото и рапично масло и съдържанието на неосапуняеми вещества, на стероли, на токофероли и на фосфор в тях. Резултатите от анализите са представени в Таблица 1.

Таблица 1

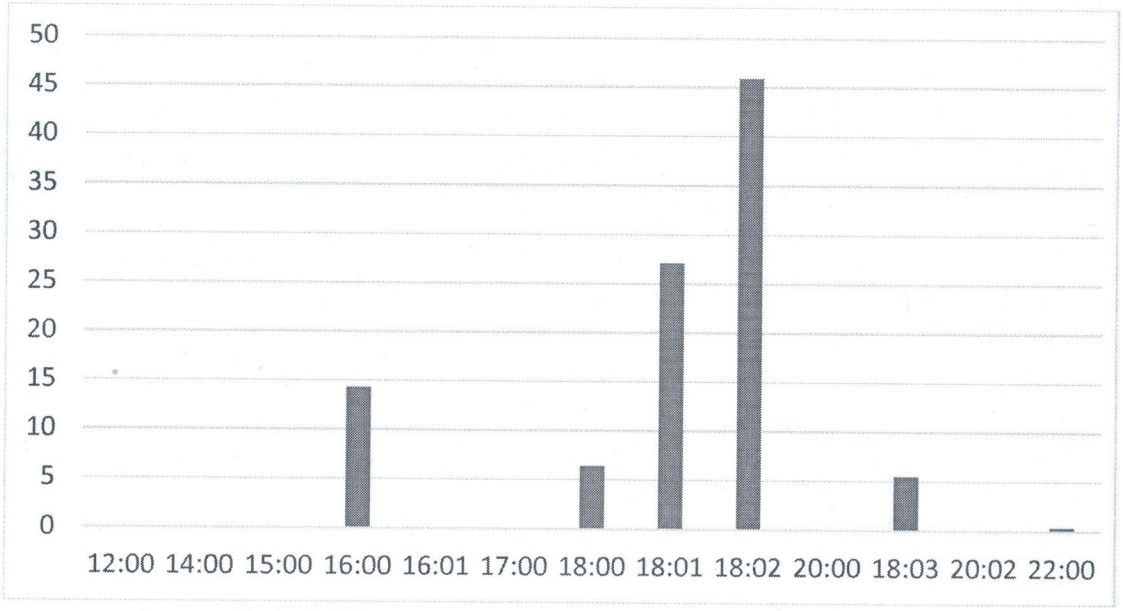
Физикохимични показатели и групов състав на изследваните масла

Показател	**Соево масло**	**Рапично масло**
Киселинно числи (mgKOH/g)	1,6	1,0
Пероксидното число (meqO_2/kg)	3,4	7,0
Неосапуняеми вещества (%)	1,6	1,7
Стероли в неосапуняемата част (%)	12,6	36,3
Стероли в маслото (%)	0,2	0,6
Съдържание на фосфор (%)	0,4	0,4
Съдържание на токофероли (mg/kg)	894	890

3. Изследвания върху липидния състав на соевото и рапично масло.

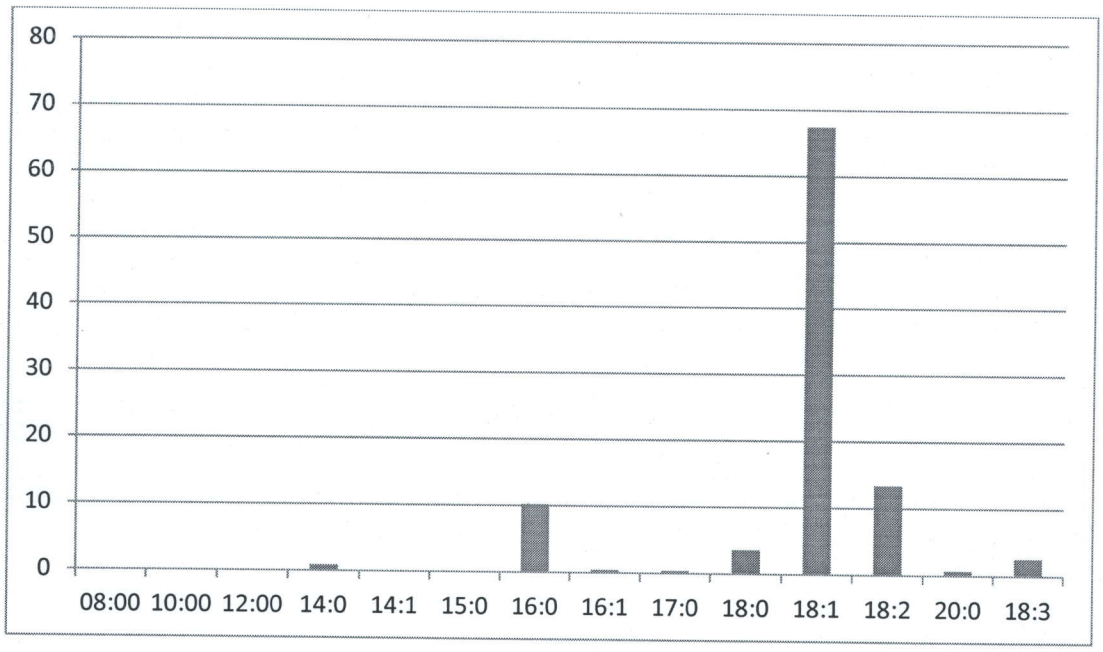
3.1. Определяне на мастнокиселинния състав на триацилглицеролите

Данните за мастнокиселинния състав на маслата са представени на фиг. 1 и фиг. 2.



Фиг. 1 Мастнокиселинен състав на соево масло

Установено е, че в мастнокиселинния състав на изследваното соево масло преобладават линоловата (45,9%) и олеиновата киселина (27,1%), следвани от палмитиновата (14,3%), стеаринова (6,4%) и линоленовата (5,5%) киселини.



Фиг. 2 Мастнокиселинен състав на рапично масло

Установено е, че в мастнокиселинния състав на изследваното рапично масло преобладават олеиновата киселина (67,5%) и линоловата киселина (13,4%), следвани от палмитиновата киселина (10,3%) и стеаринова киселина (3,6%).

Двете изследвани масла са различни по мастнокиселинен състав – соевото масло е линолов тип, а рапичното е олеинов тип, което предполага неговата по-висока оксидантна стабилност.

3.2. Определяне на стероловия състав на маслата

Данните за индивидуалния стеролов състав на изследваните масла са представени в таблица 2.

Таблица 2

Индивидуален стеролов състав на соево и рапично масло

Стероли, %	**Соево масло**	**Рапично масло**
Брасикастерол	0,1±0,03	10,5±0,1
Кампестерол	21,3±0,2	35,1±0,2
Стигмастерол	18,1±0,3	0,2±0,05
β - Ситостерол	56,4 ±0,5	53,4 ±0,5
Δ^5 – авенастерол	1,5±0,1	0,8±0,1
Δ^7 – стигмастерол	0,4±0,1	-
Δ^7 – авенастерол	0,9±0,2	-

Данните за състава на стеролите в липидите показват, че основният компонент е β-ситостеролът (56,4-53,4%), следван от кампестерола (21,3-35,1%). В соевото масло се наблюдава по-високо съдържание на стигмастерол (18,1%) в сравнение с рапичното, докато рапичното масло е с по-високо съдържание на брасикастерол (10,5%). Съдържанието на Δ^5-авенастерол в изследваните масла е минимално - 0,8 и 1,5%. Δ^7 – стигмастерол и Δ^7 – авенастерол се срещат само в соевото масло съответно (0,4% и 0,9%). Резултатите за стероловия състав на соево и рапично масло са близки до данните за тези масла, представени в стандарта за растителни масла Codex Stan.

3.3. Определяне на индивидуалния токоферолов състав на соево и рапично масло

Токофероловият състав е определен директно в маслото чрез високоефективна течно - течна хроматография с флуоресцентна детекция, като получените резултати са представени в таблица 3.

Таблица 3

Индивидуален токоферолов състав на соево и рапично масло

Токофероли, %	**Соево масло**	**Рапично масло**
α – токоферол	5,2	33,5
β – токоферол	-	-
γ – токоферол	66,8	56,0
γ – токотриенол	-	10,5
δ – токоферол	28,0	сл.

Основният компонент в соевото масло е γ - токоферола (66,8%), следван от δ-токоферол (28,0%), докато в в рапичното масло преобладаващ е γ - токоферола (56.0%), следван от α – токоферол (33,5%). α - Токоферолът в соевото масло е представен в незначително количество (5.2%), а в рапичното масло е идентифициран и ненаситен дериват на токоферолите - γ - токотриенол (10,5%).

4. В момента се провеждат изследвания върху определяне на количеството липиди, включени в състава на крайния продукт и определяне на наличие на активно вещество в изолираните липиди.

14.03.2018 год.
гр. Пловдив

Докторант:.....
/Благо Чучков/

Научен ръководител:.....
/Проф. д-р Г. Антова/

ВрИД ръководител катедра:.....
/Доц. д-р. Г. Патронов/

СТАНОВИЩЕ

относно дейността на редовен докторант Благо Спасов Чучков,
от проф. д-р Г. Антова,
научен ръководител на докторанта

Дейността на Благо Чучков, редовен докторант към катедра Химична технология, докторска програма "Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати", за първата година от отчетния период (1.03.2017 – 28.02.2018 г.) е в съответствие със задачите, поставени в индивидуалния план за първата година.

След усвояване на основните методи за анализ на липиди под ръководството на членове на катедрата той е обучен и работи самостоятелно на някои от апаратите в катедрата, необходими за научната му работа. Сравнително бързо се ориентира в материалите и методиките за анализ на липиди и в голяма степен изпълни своите задачи. През първата година в експерименталната работа бе включено изследване липидния състав на двете растителни масла, използвани за хранителна среда при получаването на антибиотика Салиномицин.

Една част от научната работа на докторанта е в завода, в който работи Биовет АД гр. Пещера, докато за тази, която трябва да бъде изработена в катедрата, се забелязва известно забавяне. Моята препоръка към докторанта е да отдели повече време както за експериментална работа по дисертацията, така и да положи усилия за допълване на литературния обзор и по - задълбочен анализ на данните от него.

През първия семестър на учебната 2017/2018 година докторант Благо Чучков е водил упражнения по „Органична химична технология" на студенти от специалност „Химия", IV курс, задочно обучение, 1 група с хорариум 30 часа. Участва и в провеждането на Производствената практика на същия курс, както и в обучението на студенти стажанти от специалност Медицинска химия, провеждащи практиката в Биовет АД, гр. Пещера през втория семестър на 2017 г.

Последните два месеци бяха отделени за подготовка на докторантския минимум, който беше успешно положен в началото на месец март (9.03.2018 г.).

Предлагам за дейността през първата година на редовен докторант Благо Спасов Чучков да се даде оценка Много добър (5).

14.03.2018 год. Научен ръководител:.....
гр. Пловдив (проф. д-р Г. Антова)

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено на 14.03.2018 г., бе разгледан ***отчетът на редовен докторант Ваня Йорданова Запрянова за втората година от докторантурата ѝ***. На заседанието присъстваха двамата научни ръководители на докторанта – доц. д-р Кирил Симитчиев и инж. д-р Елка Пискова. Доц. д-р Кирил Симитчиев запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от инж. д-р Елка Пискова, и предложи оценка за втората година на докторантурата Много Добър (5). След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научните ръководители бяха единодушно приети с 11 гласа „за“.

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

Прилагам:

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

15.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 14.03.2018

ПРОТОКОЛ №4

На 14.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11

Присъстват 11

Като гост на катедрения съвет присъстваше инж.д-р Елка Пискова, втори научен ръководител на докторант В. Запрянова

Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:

1. Годишни отчети на докторантите в катедрата
2. Учебни въпроси
3. Текущи въпроси

По точка 1.1 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Ваня Йорданова Запрянова за втората година от редовната й докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Много добър (5).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Ваня Йорданова Запрянова за втората година от редовната й докторантура с оценка Много добър (5).

16.03.20178 Протоколчик:

/П. Балабанова/

МНЕНИЕ

от доц. д-р Кирил Костов Симитчиев,
утвърдено от инж. д-р Елка Николова Пискова,
относно дейността на Ваня Йорданова Запрянова,
редовен докторант към катедра “Аналитична химия и Компютърна химия”
на Химически факултет,
за периода 01.03.2017 – 01.03.2018 г.

През втората година на редовната докторантура, Ваня Запрянова изпълни успешно предвидените задачи в индивидуалния план, касаещи обучението на докторанта и провеждането на педагогическа дейност. Докторантът посети значим набор от обучителни лекции и семинари, имащи отношение към тематичното направление на дисертационният ѝ труд. Ваня Запрянова, също така, успешно положи докторантски изпит по специалността с оценка Мн. Добър 5.25.

По отношение на преподавателската дейност, за отчетния период, докторант Запрянова участва в провеждането на учебни занятия със студенти от магистърска програма „Спектрохимичен анализ“ (общо 60 h) и студенти Бакалаври - семинари по „Статистика и метрология в химията“ (15 h с Химия I курс, задочно обучение и 30 h със слят поток от редовни студенти, специалности Химия с Маркетинг II курс и Компютърна Химия I курс). През втория семестър на учебната 2017/2018, докторантът продължава да провежда семинарни занятия по „Статистика и метрология в химията“ със специалност „Анализ и контрол“ I курс, редовно обучение.

Докторант Запрянова старателно и прецизно проведе експериментални изследвания по темата на дисертационния си труд. Посредством моделиране на химичния експеримент са оптимизирани инструменталните условията за измерване на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn чрез атомно-емисионен спектрометър с микровълнова плазма MP-AES Agilent 4200. Проучена е появата на спектрални пречения от матрични компоненти при определяне на посочените целеви елементи в продукти от отработени биоотпадъци чрез оптико-емисионен спектрометър с индуктивно свързана плазма ICP-OES Thermo Scientific iCAP 6300. Проведени са първоначални изследвания за установяване на оптималните работни условия за регистриране на сигналите на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn чрез ICP-OES Agilent 720.

За периода, обхващащ втората година от докторантурата, Ваня Запрянова самостоятелно подготви и представи два постера и един доклад на научни форуми в България. През отчетната година излезе от печат една статия в списание с импакт фактор, в която докторанта е първи автор (статията бе подадена за публекуване през първата година от докторантурата - Ноември 2016).

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

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

13.03.2018 г. Научни ръководители:.....

доц. д-р Кирил Симитчиев

.....

инж. д-р Елка Пискова

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

на
Ваня Йорданова Запрянова
редовен докторант към катедра “Аналитична химия и Компютърна химия”
на Химически факултет

За втора година от докторантурата
(за периода 01.03.2017 – 01.03.2018 г.)

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

Изготвеният годишен отчет е съобразно индивидуалния план за работа, предвиден за втората година от докторантурата.

I. Обучение.

1. Посетих специализиран семинар „FOT EXPO 2017” фокусиран върху „Liquid Chromatography with MS detection, Data Integrity, Certified Reference Materials and Proficiency Testing“ с лектори Coralie Leonard, Matthias Rietdorf и Arjan Timmerman. Семинарът бе проведен на 23 и 24 март 2017 в Хотел „Рамада Тримонциум“, гр. Пловдив.
2. Посетих интензивен курс лекции на тема „Organic Stereochemistry“ с лектор Prof. Dr. Francisco Alonso Valdes, University of Alicante, Spain, който бе проведен на 20 и 21 април 2017 в Химически Факултет на ПУ „Паисий Хилендарски, гр. Пловдив.
3. Посетих интензивен курс лекции на тема „Separation techniques: past, present and future“ с лектор Assist. Prof. Dr. Lorena Vidal Martinez, University of Alicante, Spain, който бе проведен на 04 и 05 май 2017 в Химически Факултет на ПУ „Паисий Хилендарски, гр. Пловдив.
4. Посетих семинар организиран съвместно от Химическия факултет на ПУ "Паисий Хилендарски" и фирма Т.Е.А.М. на тема „Приложение на

масспектралните техники при определянето на биоактивни вещества“, който бе проведен на 19 октомври 2017 г. в ПУ "Паисий Хилендарски", гр. Пловдив.

Лектори бяха John Upton, PhD и Shaun Bilsborough, PhD – продуктови специалисти към Agilent Technologies и представиха лекции на следните теми:

- Прилагане на широк набор от GC/MS техники за постигане на най-добри резултати при откриването и идентифицирането на химически обекти в сложни биологични проби;
- Истински иновации в LC/MS техниките с „Fit-for-purpose” решения;
- Прилагане на масспектрометрия и анализ на метаболитните пътища в разбирането на биохимията на лечебните растения.

5. Посетих тридневен курс организиран от Център за професионално обучение към „Интерпроджект“ ЕООД, който бе проведен в периода 13 – 15 декември 2017 г. в гр. София с лектори Марина Георгиева и инж. Елеонора Крафти. Курсът бе на следните теми:
   - Вътрешни одитори и отговорници по качеството в лаборатории за изпитване (пробовземане) и/или калибриране по стандарти БДС EN ISO 19011:2011 – БДС EN ISO/IEC 17025:2006 и БДС EN ISO/IEC 17025:2017;
   - Вътрешни одитори и отговорници по качеството в органи за контрол по стандарти БДС EN ISO 19011:2011 – комплекса БДС EN ISO/IEC 17020:2012/ILAC-P15:07/2016;
   - Актуални изисквания при внедряване и обновяване на системите за управление.
6. Посетих публична академична лекция на доц. д-р Кирил Симитчиев на тема „Нови изисквания за контрол на онечиствания от химични елементи във фармацевтични продукти“, която се проведе на 02 февруари 2018 в ПУ „Паисий Хилендарски“, гр. Пловдив.
7. Посетих и успешно завърших курс по английски език - ниво „Intermediate“ в езиково училище Maximum.
8. Положих докторантски изпит по специалността, като преминах успешно писмения и устния изпит пред комисията със средна оценка Много добър 5,25.

II. Работа по дисертацията:

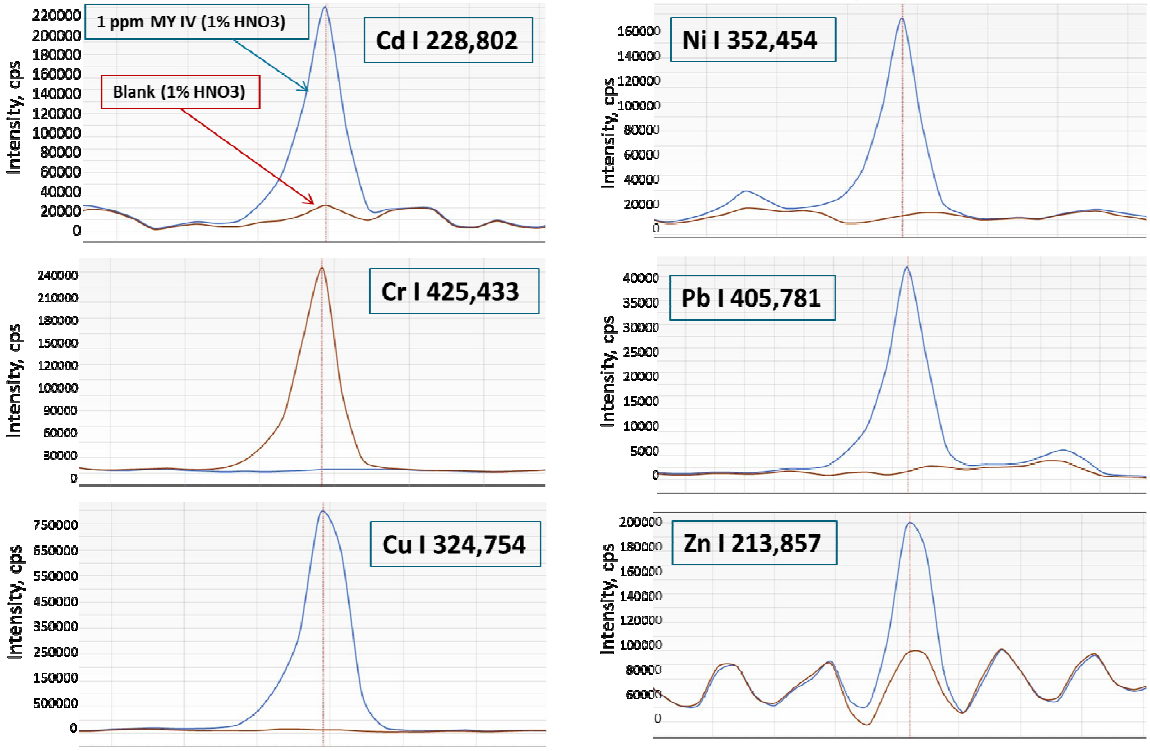
1. Актуализиране на литературната справка и оформяне на раздела литературен обзор.

Базата данни с литературни източници, имащи отношение към темата на дисертацията бе актуализирана. Започнато бе оформяне на раздела литературен обзор.

2. Експериментална работа по изследователската тема.
   - Оптимизация на инструменталните условията за измерване на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn с атомно-емисионен спектрометър с микровълново генерирана плазма Agilent 4200.

Оптимизацията на работните условия, при които се регистрират сигналите в спектрохимичния анализ, има за цел постигане на максимално съотношение

сигнал-шум при инструменталните измервания. Проведено бе оптимизиране на условията за инструментално измерване при определянето на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn чрез атомно-емисионна спектрометрия с микровълново генерирана плазма (MP-AES), посредством използване на стандартни разтвори на целевите елементи в 1% v/v воден разтвор на азотна киселина. За всеки от елементите беше регистриран набор от спектрални линии и за следващите измервания бяха подбрани най-чувствителните аналитични линии: Cd I 228.802; Cr I 425.433; Cu I 324.754; Ni I 352.454; Pb I 405.781; Zn I 213.857. Избран бе подход за работа с максимум на регистрираните сигнали, които бяха нулирани спрямо сигнала на празната проба (on-peak). На фигура 1 са визуализирани спектралните профили на регистрираните сигнали на изследваните елементи:



Фигура 1. Спектрален профил на най-чувствителните аналитични линии на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn, регистрирани чрез MP-AES (на абциса – дължина на вълната в nm). Условия: регистрирани са сигналите на многоелементен стандартен разтвор (1 ppm) в 1% v/v азотна киселина и празна проба - 1% v/v азотна киселина

Недостатък на еднофакторната оптимизация е, че чрез нея не може да се установи дали съществува взаимно влияние между изследваните параметри на инструменталното измерване. Поради тази причина бе проведено моделиране на химичния експеримент, посредством централно-композиционен план (Таблица 1), включващ скоростта на потоците на пулверизиращия газ (NFR) и пробата (SFR), както и точката на оптично наблюдение (VP). NFR параметъра бе вариран в диапазона 0.4 - 0,8 L/min, SFR в интервала 0.63 – 2.23 ml/min и VP съответно в границите от -34 до 34 условни единици (Таблица 1):

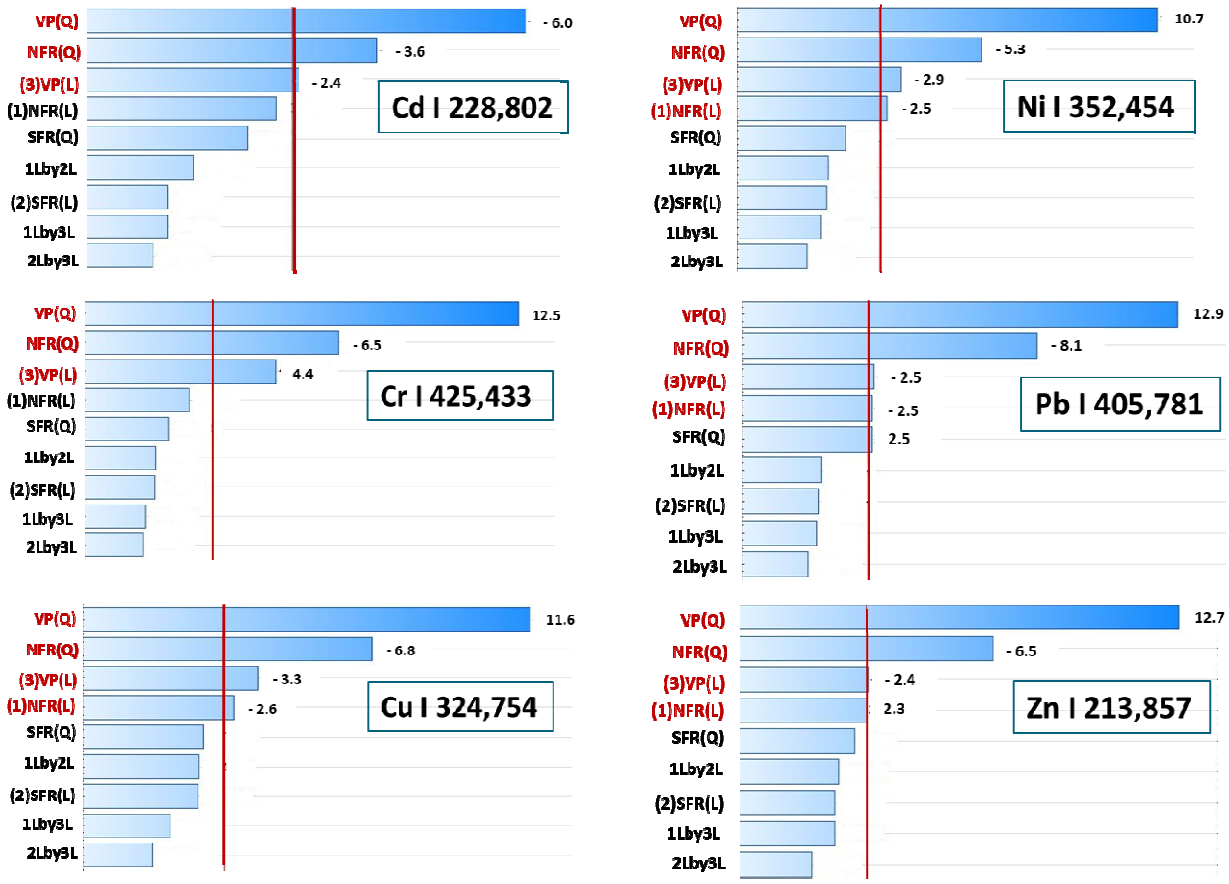
Таблица 1. Използван централно-композиционен план, включващ три променливи: скорост на потока на пулверизиращия газ (NFR), обемна скорост на потока проба (SFR) и точка на оптично наблюдения (VP).

№ експеримент	NFR, L/min	SFR, ml/min	VP, усл. ед.
1 (централна точка)	0.60	1.43	0
2	0.70	0.95	20
3	0.50	1.91	20
4	0.60	1.43	34
5	0.77	1.43	0
6	0.70	1.91	20
7 (централна точка)	0.60	1.43	0
8	0.60	0.63	0
9	0.60	2.23	0
10	0.50	0.95	-20
11	0.50	1.91	-20
12	0.70	1.91	-20
13 (централна точка)	0.60	1.43	0
14	0.50	0.95	20
15	0.70	0.95	-20
16	0.43	1.43	0
17	0.60	1.43	-34
18 (централна точка)	0.60	1.43	0

Получените данни след реализирането на централно-композиционният план бяха използвани за моделиране на инструменталния отклик съгласно уравнението:

$$\text{Интензитет} = a_1.VP^2 + a_2.SFR^2 + a_3.NFR^2 + a_4.VP + a_5.SFR + a_6.NFR + a_7.SFR.VP + a_8.NFR.VP + a_9.NFR.SFR + a_9.NFR.SFR + a_{10} \quad \textbf{уравнение (1)}$$

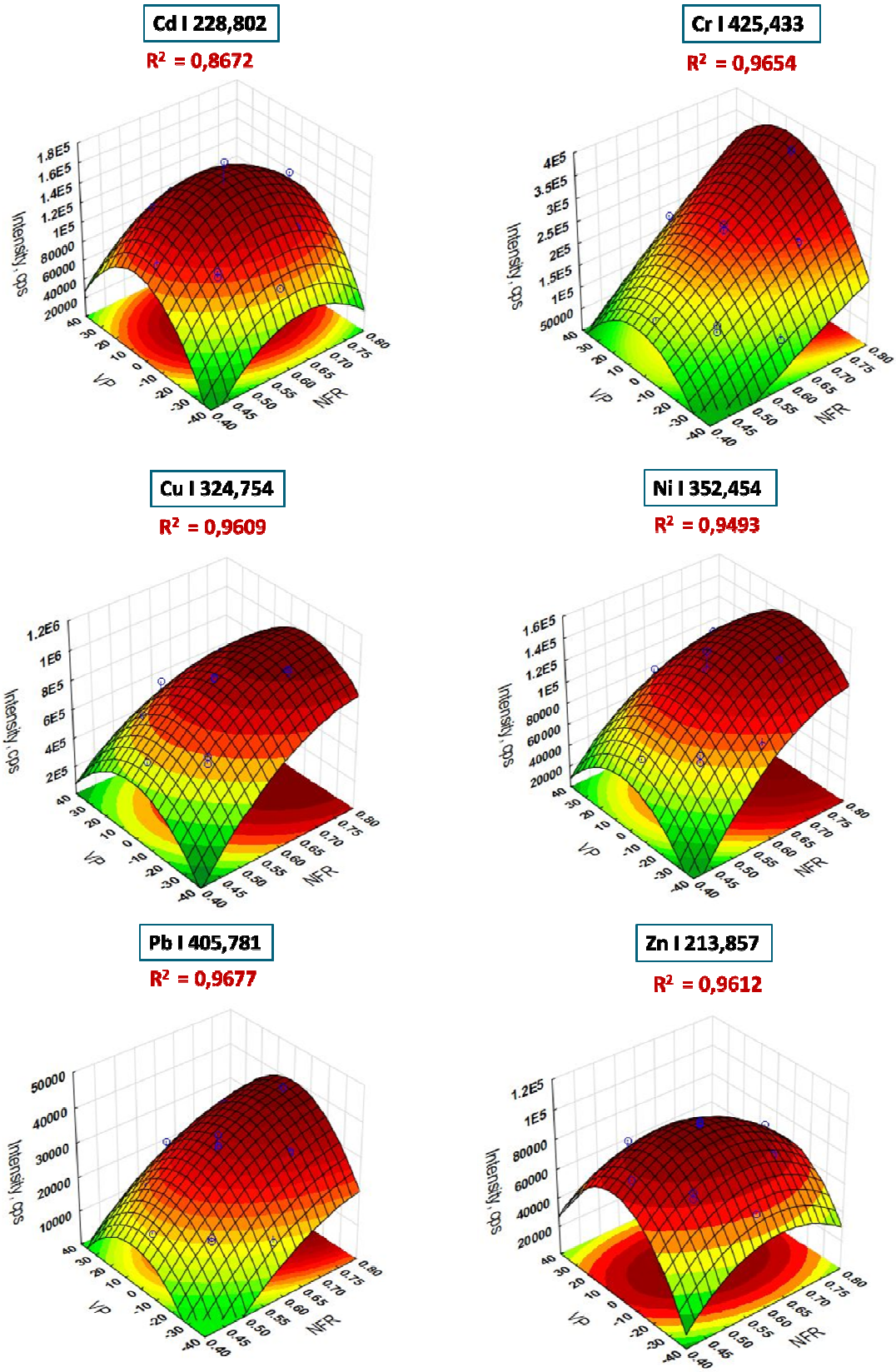
В моделното уравнение (ур. 1) бяха включени членове от първа и втора степен, както и смесени членове на променливите. Получените резултати за значимостта на изследваните параметри са представени на фигура 2 под формата на стандартизирани Парето диаграми.



Фигура 2. Стандартизирани Парето диаграми за откроряване на променливите, които оказват статистически значимо влияние върху интензитета на сигнала при MP-AES измерване (на абциса: p-value, намаляващо от ляво на дясно; вертикалната линия съответства на граничната стойност на p-value = 0.05; Q-квадратен член; L-линеен член; LbyL – смесени линейни членове)

От фигура 2 се вижда, че за всички наблюдавани линии най-съществено и статистически значимо влияние върху интензитета на регистрираните сигнали имат квадратните членове на потока на пулверизиращия газ и точката на оптично наблюдение. Важно заключение, което може да се направи е, че не се наблюдава взаимно (смесено) влияние между праволинейните членове на изследваните параметри. От фигура 2 също така може да се заключи, че обемната скорост на пробния поток практически не влияе върху интензитета на сигналите. Най-вероятната причина за това е, че в изследваните диапазони от стойности на параметрите ефекта на SFR е значително по-малък от този на NFR и поради това не може да бъде откроен.

На фигура 3 са представени повърхнините, получени от моделните уравнения при фиксирана стойност на обемната скорост на пробния поток (SFR = 1.4 ml/min). От високите стойности на коефициентите на детерминираност ($R^2 > 0.85$) може да се заключи, че математичните модели адекватно описват изменението на интензитета като функция от NFR и VP.



Фигура 3. Повърхнини, получени от моделните уравнения при фиксирана стойност на обемната скорост на пробния поток (SFR = 1.4 ml/min)

В таблица 2 са представени изчислените максимални стойности на интензитетите, съгласно математичните функции и съответстващите им доверителни интервали при статистическа сигурност 95%. В таблица 2 също така са представени и стойностите на изследваните променливи, при които са наблюдавани максимуми в моделните уравнения.

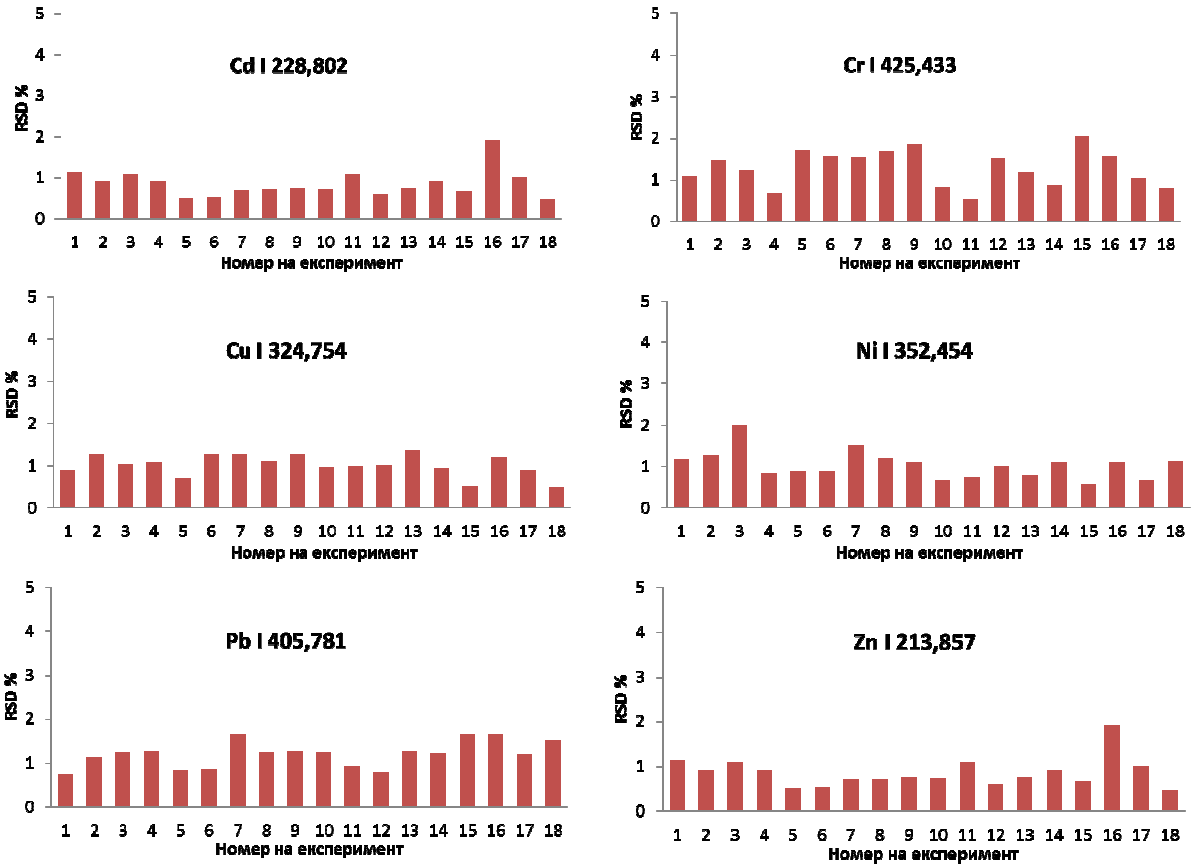
Таблица 2. Стойности на променливите, при които се наблюдава максимум на функцията и съответстващия им интензитет, изчислен чрез математичния модел

	Cd I 228,802	**Cr I 425,433**	**Cu I 324,754**	**Ni I 352,454**	**Pb I 405,781**	**Zn I 213,857**
NFR, L/min	0.6	1.0	0.8	0.8	0.8	0.6
SFR, ml/min	1.0	1.6	2.2	1.3	1.5	1.1
VP, усл. ед.	3	0	-11	-7	1	-1
Изчислена стойност на интензитета, cps	$14.6*10^4$	$46.3*10^4$	$10.2*10^5$	$14.3*10^4$	$4.0*10^4$	$9.5*10^4$
-95 % ДИ	$13.3*10^4$	$27.1*10^4$	$8.3*10^5$	$12.4*10^4$	$3.3*10^4$	$9.1*10^4$
+95 % ДИ	$16.0*10^4$	$65.6*10^4$	$12.1*10^5$	$16.2*10^4$	$4.8*10^4$	$9.9*10^4$

Оптимизацията на работните условия при инструменталното измерване има за цел постигане не само на най-висока чувствителност, но и на добра прецизност. В настоящата работа генерирания централно-композиционен план (таблица 1) бе използван и за алтернативна оптимизация, имаща за цел подобряване на повторяемостта при определяне на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn чрез MP-AES. За най-чувствителните спектрални линии на целевите елементи бе измерено стандартното отклонение на аналитичните сигнали в условия на повторяемост при пет измервания. Извършено бе пропагиране на неопределеността привнесена от стъпката на нулиране по празна проба (ур. 2) и прецизността бе оценена посредством изчисляване на относително стандартно отклонение (RSD%).

$$RSD\%_{propagated} = \frac{\sqrt{(SD_{Standard})^2+(SD_{Blank})^2}}{Signal_{Standard}-Signal_{Blank}} x\,100 \qquad \textbf{уравнение (2)}$$

Резултатите от проведената оптимизация са представени на фигура 4. Установено бе, че в някои случаи относителното стандартно отклонение нараства приблизително 3 пъти (напр. сравнение на експеримент 11 и 15 за линията Cr I 425.433).



Фигура 4. Относително стандартно отклонение при всички експерименти от CCD матрицата

С оглед реализирането на едновременен многоелементен анализ бяха избрани следните компромисни условия: скорост на потока на пулверизиращия газ - 0,65 L/min; скорост на потока на пробата – 1,4 ml/min; точка на оптично наблюдение - 0. Математичните модели, предвиждащи величината на интензитета на сигналите бяха приложени за тези компромисни условия и за всички изследвани аналитични линии бе установено че, получените стойности за интензитета попадат в доверителните интервали, представени в таблица 2. Последното е доказателство, че избраните компромисни условия на работа са адекватни за всеки един от целевите елемента.

- Изследване на спектралните пречения от матрични компоненти при ICP-OES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в продукти от биоотпадъци

Атомно-емисионните спектрални методи с индуктивно свързана плазма (ICP-OES) и микровълново генерирана плазма (MP-AES) са инструментални методи, при които е възможна появата на спектрални пречения при анализа на проби с високо солево съдържание. С цел да се проучи потенциалното спектрално пречещо влияние от матричните елементи, които реално присъстват в продукти от биоотпадъци (компост, ферментационен продукт и стабилизирана органична фракция от механично-биологично третиране) бе проведен полуколичествен анализ чрез масспектрометрия с индуктивно свързана плазма (ICP-MS) за определяне на макроелементите в изследваните проби. Пробите бяха подложени на

микровълново-подпомогната екстракция с азотна киселина, съгласно БДС EN 16173 след което бяха анализирани чрез ICP-MS Agilent 7700. Резултатите са представени в таблица 3.

Таблица 3 Резултати от количествен и полуколичествен ICP-MS анализ

	Na*, g/kg	**Mg*, g/kg**	**Al*, g/kg**	**P**, g/kg**	**S**, g/kg**	**K*, g/kg**	**Ca*, g/kg**	**Fe*, g/kg**
Компост (Производител 1)	0.8	7.0	8.0	26.0	7.0	11.0	9.4	13.8
Компост (Производител 2)	1.0	4.0	2.8	4.0	3.6	9.2	4.5	2.9
Компост (Производител 3)	0.8	5.1	5.6	13.4	5.5	4.4	8.3	9.9
Ферментационен продукт	1.1	6.1	1.5	11.6	5.3	19.5	2.9	1.7
Стабилизирана органична фракция от МБТ	3.5	3.9	8.4	6.8	7.4	6.1	9.6	11.0

* количествен анализ (RSD < 5%);
** полуколичествен анализ

Проучени бяха спектралните пречения при аксиално и радиално наблюдение на аналитични линии на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn при ICP-OES анализ. Оценката на спектралните пречения бе извършена чрез приготвяне на индивидуални разтвори на потенциалните пречещи елементи с концентрация, съответстваща на тази в изследваните биоотпадъци и наблюдение на сигналите, които те генерират на спектралните линии на аналитите. При аксиално наблюдение бе установено емисионно препокриване от Fe на следните спектрални линии (nm): Cd 226.502, Cd 214.438, Cr 283.563, Pb 261.418 и Pb 283.306 (Таблица 4). За линията Cr 283.563, спектралното пречене бе наблюдавано и в режим на радиално наблюдение.

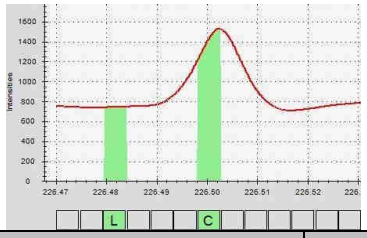
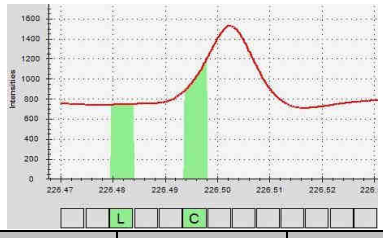
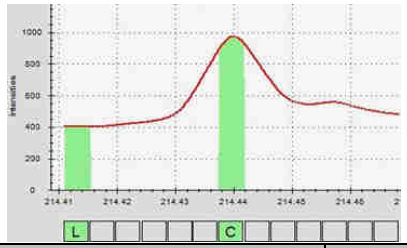
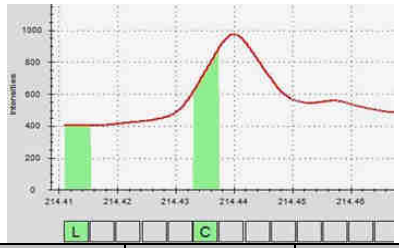
Таблица 4. Спектрални линии на аналитите, които имат емисионно препокриване от линиите на желязото

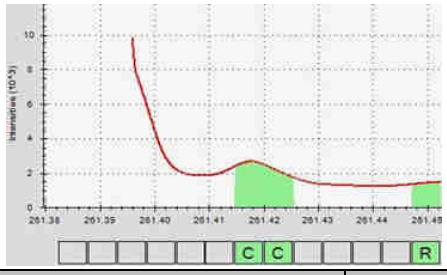
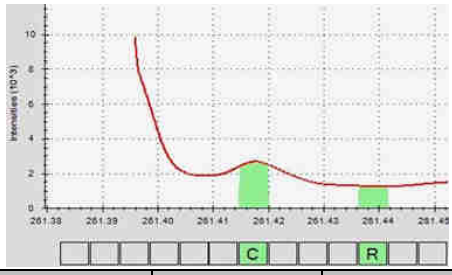
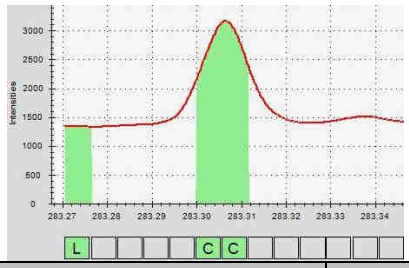
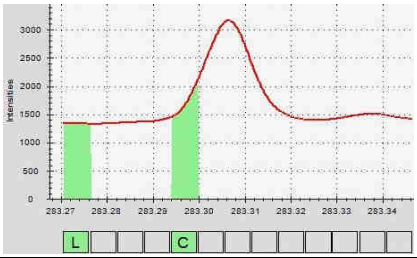
Спектрална линия на аналита	**Спектрална линия на пречещия елемент**		
Cd II 226.502	Fe I 226.505		
Cd II 214.438	Липсва в спектралната база данни на ICP-OES		
Cr II 283.563	Fe I 283.546	Fe II 283.571	Fe I 283.595
Pb I 261.418	Fe II 261.382	Fe II 261.419	
Pb I 283.306	Fe II 283.309		

Извършено бе оптимизиране на зоната на интегриране и фоновата корекция с цел намаляване на спектралното пречене от линиите Fe върху тези на Cd и Pb. В таблица 5 са представени резултатите. За оценка на пречещото влияние е използван фаторът F, който се дефинира по уравнение 3:

$$F\% = \frac{Sig_{interference}}{Sig_{total}} . 100 \qquad \textbf{Уравнение (3)}$$

Таблица 5. Пречещо вклияние на желязо върху емисионни линии на кадмий и олово: А) Зона 1 за интегриране; Б) Зона 2 за интегриране и фонова корекция

Cd 226.502 II (Axial)				
Зона 1 		Зона 2 		
А) Зона 1	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	454	714	0.51	**64**
Компост 2	96	107	0.34	**90**
Компост 3	327	511	0.72	**64**
Ферментационен продукт	55	69	3.83	**80**
Стабилизирана органична фракция от МБТ	361	1576	0.95	**23**
Б) Зона 2	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	68	219	0.49	31
Компост 2	под LOQ			
Компост 3	49	134	1.71	37
Ферментационен продукт	под LOQ			
Стабилизирана органична фракция от МБТ	54	598	0.68	9
Cd 214.438 II (Axial)				
Зона 1 		Зона 2 		
А) Зона 1	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	188	638	0.66	**30**
Компост 2	40	128	1.34	**31**
Компост 3	136	441	0.52	**31**
Ферментационен продукт	23	103	1.40	**22**
Стабилизирана органична фракция от МБТ	150	1604	0.92	**9**
Б) Зона 2	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	53	351	1.18	**15**
Компост 2	11	71	1.78	**16**
Компост 3	38	231	0.24	**16**
Ферментационен продукт	6	59	0.36	**11**
Стабилизирана органична фракция от МБТ	42	890	0.31	**5**

Pb 261.418 I (Axial)				
Зона 1		Зона 2		
				
А) Зона 1	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	406	1097	1.34	**37**
Компост 2	86	134	3.56	**64**
Компост 3	292	1015	0.96	**29**
Ферментационен продукт	под LOQ			
Стабилизирана органична фракция от МБТ	323	1491	0.22	**22**
Б) Зона 2	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	879	1709	0.34	**51**
Компост 2	187	226	0.53	**83**
Компост 3	633	1557	0.57	**41**
Ферментационен продукт	под LOQ			
Стабилизирана органична фракция от МБТ	699	2211	0.16	**32**
Pb 283.306 I (Axial)				
Зона 1		Зона 2		
				
А) Зона 1	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	415	1562	0.42	**27**
Компост 2	под LOQ			
Компост 3	299	1453	0.78	**21**
Ферментационен продукт	под LOQ			
Стабилизирана органична фракция от МБТ	330	2196	0.29	**15**
Б) Зона 2	Int, cps (Fe)	Int, cps (Fe+Cd)	RSD, % (Fe+Cd)	**F,%**
Компост 1	12	157	5.76	**8**
Компост 2	под LOQ			
Компост 3	9	144	5.95	**6**
Ферментационен продукт	под LOQ			
Стабилизирана органична фракция от МБТ	9	212	2.56	**4**

От проведените изследвания на спектралите пречения и оптимизацията на зоната за интегриране са направени следните заключения:

- Поради ниските концентрации на Cd и Pb в пробите бе целесъобразно да се приложи само аксиално наблюдение на спектралните линии за тези елементи;
- Линиите, които са с най-висок интензитет и са свободни от спектрални пречения са: Cd 228.802; Cr 267.716; Cu 324.754; Ni 231.647; Pb 220.353; Zn 213.856;
- От макроелементите в пробата само желазото има значимо пречещо влияние;
- Поради двустранно спектрално пречене от желязо върху Cr 283.563 не се препоръчва използването на тази линия за анализ на хром;
- При кадмия и за двете линии Cd 214.438 и 226.502, оптимизацията на зоната на интегриране намалява пречещото влияние, но не го елиминира напълно;
- При Pb 261.418 се наблюдава двустранно спектрално пречене и затова изместването на зоната на интегриране от средата на пика не повлиява пречещото влияние, докато при Pb 283.306 то почти изчезва, но за сметка на това инструменталната чувствителността силно намалява и повторяемостта значително се влошава;
- За цялостно премахване на пречещото влияние върху линиите на Cd 214.438 226.502, Pb 261.418 и Pb 283.306 е необходимо да се приложи метод за разделяне или математична корекция на спектралните пречения.

- Еднофакторна оптимизация на инструменталните условията за измерване на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn с атомно-емисионен спектрометър с индуктивно свързана плазма Agilent 720.

Извършена бе еднофакторна оптимизация на набор инструментални параметри при измерване на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn с оптико-емисионен спектрометър с индуктивно свързана плазма Agilent 720. Изследвано бе влиянието върху инструменталната чувствителност на скоростта на потока на пулверизиращия газ (0,6 – 0,8 L/min), скоростта на потока на пробата (0,8 – 1,5 ml/min) и мощността на плазмения разряд (1,0 – 1,3 kW). За провеждането на оптимизацията бяха използвани празна проба (1% v/v азотна киселина) и мултиелементен стандартен разтвор. За всеки изследван елемент бяха наблюдавани няколко спектрални линии – атомни и йонни. Установено е, че чувствителността нараства при намаляване на скоростта на потока на пулверизиращия газ и при увеличаване на мощността на плазмения разряд. Скоростта на потока на пробата не оказва съществено влияние върху чувствителността. Получените данни бяха използвани като ориентировъчна информация за създаването на план-матрица за следваща многофакторна оптимизация на посочените инструментални параметри чрез централно-композиционен план, с цел да се установи дали има взаимно влияние между изследваните параметри.

III. Педагогическа дейност.

1. През втори семестър (20.02 – 03.06.2017) на учебната 2016/2017 година проведох семинари по „Статистика и метрология в химията“ (30 h), на студенти от специалност Химия с маркетинг II курс и Компютърна химия I курс, редовно обучение.

2. Участвах в провеждането на практическите занятия по „Атомно емисионна спектрометрия“ (40 h) и упражненията по „Метрология и управление на качеството“ (20 h) през втори семестър на академичната 2016/2017 година, на студенти магистри от специалност Спектрохимичен анализ

3. На 03 и 04.02.2018 г. посетих лекции по „Статистика и метрология в химията“ за специалност Химия I курс (задочно обучение) с лектор доц. д-р Кирил Симитчиев

4. В периода 05 – 07.02.2018 г. проведох семинари по „Статистика и метрология в химията“, на студенти от специалност Химия I курс, задочно обучение (15 h).

5. През втори семестър (19.02 – 02.06.2018) на учебната 2017/2018 година започнах провеждането на семинари по „Статистика и метрология в химията“ (45h), на студенти от специалност Анализ и контрол I курс, редовно обучение.

IV. Участие в научни форуми и публикации.

1. Взех участие в семинар с международно участие, организиран съвместно от Химически факултет на ПУ "Паисий Хилендарски" и фирма ACM2, на тема „Приложение на съвременни аналитични техники в областта на аналитичната химия, токсикологията и околната среда“, който се проведе в ПУ „Паисий Хилендарски“ на 14.06.2017 г. Представих постер, който беше на тема „Изследване на спектралните пречения от матрични компоненти при ICP-OES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn в продукти от биоотпадъци”.

2. Взех участие в научна сесия „Дни на науката 2017” на СУБ-Пловдив, която се проведе на 2 и 3 ноември 2017 г. в Дома на учените, гр. Пловдив. Представих постер, който беше на тема „Влияние на работните условия върху повторяемостта на инструменталното измерване при MP-AES анализ на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn: оптимизация чрез експериментален дизайн”.

3. Взех участие в Четвърта научна конференция за студенти, докторанти и млади учени "Предизвикателства в Химията" Пловдив 2017, организирана от Химическия факултет на ПУ "Паисий Хилендарски" със съдействието на Поделение "НПД" и Студентски съвет при ПУ, която се проведе на 10 и 11 ноември 2017 г. в ПУ "Паисий Хилендарски". Представих доклад на тема „Приложение на централно - композиционен план за оптимизиране на инструменталните условия при MP-AES определяне на Cd, Cr, Cu, Ni, Pb и Zn”.

4. Публикувана е статия:

   V. Zapryanova, K. Simitchiev, E. Piskova, Determination of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb and Zn in compost: evaluation of different approaches for sample preparation and instrumental analysis (MP-AES as an alternative to ICP-OES), *Bulgarian Chemical Communications*, **49** (issue G) (2017)10-15.

Препоръки:

Докторант:.....
Ваня Запрянова

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

.....
инж. д-р Елка Пискова

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”, проведен на 14.03.2018 г., бе разгледан отчетът на редовен докторант ***Мина Тенева Кирякова за втората година от докторантурата ѝ***. Научният ръководител доц. д-р Веселин Кметов запозна членовете на катедрата със становището си и предложи оценка за втората година на докторантурата Много Добър (5). 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 Мина Тенева Кирякова с оценка Много Добър (5).

Прилагам:

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

15.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 14.03.2018

ПРОТОКОЛ №4

На 14.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11
Присъстват 11
Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:
1. Годишни отчети на докторантите в катедрата
2. Учебни въпроси
3. Текущи въпроси

По точка 1.2 от дневния ред беше изслушан отчетът на докторант Мина Тенева Кирякова за втората година от редовната й докторантура. След дискусия отчетът беше приет с 11 гласа “за” и беше дадена оценка Много добър (5).

Решение: Катедреният съвет предлага на ФС на ХФ да приеме отчета на Мина Тенева Кирякова за втората година от редовната й докторантура с оценка Много добър (5).

16.03.2017 Протоколчик:
/П. Балабанова/

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Веселин Йорданов Кметов,

научен ръководител, на **Мина Тенева Кирякова**

редовен докторант към катедра Аналитична химия и компютърна химия за извършените дейности през втората година (03.2017-02.2018)

по тема: **„Подобряване на качеството на аналитичните резултати чрез изчисляване на бюджета на неопределеност"**

Докторант Мина Кирякова е зачислена в редовна докторантура по Аналитична химия със Заповед на Ректора № Р33-958 от 26.02.2016 г. Темата на докторантурата бе формулирана твърде общо, тъй като по-време на нейното зачисляване, не бе ясно към каква инструментална апаратура ще се насочат изследванията на докторанта. През втората година докторант Кирякова фокусира експериментите си проучвания върху емисионния елементен анализ с използване на микровълнова плазма чрез авангардната инструментална техника работеща с азотна плазма. Тя овладя операторската работа с предоставения ни от фирма TEAM демонстрационен апарат Agielent 4200 MP-AES. Изследванията и се насочиха към подхода на хидридна генерация, като метод за получаване на летливи хидриди. Същите могат да бъдат транспортирани под форма на газова фаза в клетка за генериране на спектрален сигнал. Интересни за проучване и все още недостатъчно охарактеризирани са аналитични процедури комбиниращи хидридната генерация (ХГ) с азотна микровълнова плазма. От TEAM ни бе предоставена мултифункционална камера (патент на Agilent) с възможности за on-line генериране и пренос на хидриди. Ето защо докторант Кирякова разви експерименталната си работа по адаптирането и оптимизирането на посочената иновативна инструментална постановка. До момента изследванията са проведени само по отношение на определяне на арсен, като в последствие могат да се разширят и към определяне на селен.

До момента са постигнати резултати относно подходи за предредукция и уеднаквяване на формите на присъствие на As преди етапа на хидридообразуване. Охарактеризирано е влиянито на киселинността на средата и съотношението на реактивите върху ефективността на генерирането и преноса на газообразните хидриди, опитмизирани са инструментални параметри с оглед понижаване на границите на откриване и определяне на метода и подобряване на неговата устойчивост. Започнати са проучвания за приложение на метода при определяне на арсен в морска вода.

Въз основа на гореизложеното считам за уместно да бъде променена и конкретизирана темата на докторанта като:

от ***„Подобряване на качеството на аналитичните резултати чрез изчисляване на бюджета на неопределеност"***,

бъде изменена на ***„Подобряване на аналитичните характеристики при хидридна генерация в комбинация с емисионна спектрометрия с микровълнова плазма"*.**

През втората година на обучение докторант Мина Кирякова, съгласно индивидуалния план, продължи работата си по набирането на литературни източници и тяхното систематизиране с оглед изработване на литературна справка с възможности за обработка на платформа Mendeley. В литературния обзор се включиха методи за хидридна генерация и комбинациите им със спектрални методи.

Изготвен бе и конспект за докторантски минимум в който бяха застъпени и методите за хидридообразване. След подготовка по конспекта Кирякова успешно положи изпита по специалността пред комисия с оценка отличен.

През втората година на обучение Мина Кирякова, изготви и представи реферат на тема хидридна генерация. Тя взе участие в шест обучителни семинара, които са посочени в нейния отчет. Докторантът участва в изготвянето и представянето на научни форуми в Пловдив на две научни съобщения като постерни презентации и изнесе устен доклад на 4 Научна конференция за студенти и докторанти, а част от резултатите от нейните изследвания бяха представени на научен форум в Благоевград.

По отношение на педагогическата си дейност, докторант Кирякова проведе 100 часа упражнения със студенти от бакалавърски и магистърски програми, които са представени в нейния отчет.

В заключение считам, че докторант Мина Кирякова изпълни работния план от втората година на обучение по докторантска програма „Аналитична химия“.

Необходимо е тя да интензифицира работата си, като положи повече усилия за задълбочено вникване и научно тълкуване на експерименталните резултати. Очаквам от докторанта да подобри ефективността си при систематизиране и описване на изследователската си дейност.

Въз основа на гореизложеното, предлагам Катедреният съвет на КАХКХ и Факултетният съвет на ХФ, да приемат оценка **МНОГО ДОБЪР 5** на докторант Мина Тенева Кирякова за ВТОРАТА година от докторантурата.

13 МАРТ 2018 г. С уважение:

Доц. д-р В. Кметов

ОТЧЕТ

Отчет за извършените дейности през първата година на подготовка (03.2017-03.2018)
на Мина Тенева Кирякова,
редовен докторант към Химически Факултет; катедра АХКХ
Професионално направление: 4.2 Химически науки
Докторантска програма: АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ
Дата на записване в докторантура: 01.03.2016 година Заповед № РЗЗ-958 от 26.02.2016
Тема на дисертационната работа:
„Подобряване на качеството на аналитичните резултати чрез изчисляване на бюджета на неопределеност”,
утвърдена от Факултетния съвет в заседание от 23.02.2016 протокол № 177

Наименование на работите	Форма на подготовка	Срок за провеждане (месеци)	Форма за завършване	Отчет
I. ОБУЧЕНИЕ				
Подготовка и полагане на докторантски минимум	Консултации СП 150 h	Март 2017 - Май 2017	Изпит пред комисия	Изпълнено
Особености в изследователската теория и практика по направлението на темата на дисертанта	Лекции 20 h Лаб. 50 h СП 150 h	Март – Юни 2017	Реферат	Изпълнено
Факултативни курсове	Лек+сем. 30 h	Март 2017 Март 2018	Сертификат	Изпълнено

II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА

Актуализиране на литературния обзор и и систематизация на изводите	Консултации и сам. работа	Април – Юни 2017	Докладване на работата	Изпълнено
Експериментална работа по изследователската тема	Консултации и сам. работа 1380 h	Март 2017 Март 2018	Тримесечни отчети	Изпълнено

III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ

Провеждане на упражнения със студенти – инструметални методи за анализ - хроматофрафски анализ	Лаб. 60 h	Март 2017 Март 2018	Упражнения със студенти	Изпълнено

Изпълнение на работния план:

I. ОБУЧЕНИЕ

Разработване на аналитичен метод : Определяне на остатъчен въглерод в кръвен серум при различни условия на киселинна минерализация чрез MP-AEC за участие в постер на тема: “Optimization of MW assisted digestion of human serum for ICP-MS multielement analysis”
Прилагане на аналитичния метод, върху реални проби.
Представяне на резултатите в постер на семинар с международно участие организиран от АСМ 2 на тема: „ Приложение на съвременни аналитични техники в областта на клиничната химия, токсикологията и околната среда“ на 14.06.2017.

Посещение на семинар „ FOT Expo “ на фирма Waters с акценти на темите: HPLC-MS, CRM , PT – сертификат

Посещение на интензивен курс лекции на Assist. Prof. Dr. Lorena Vidal Maryinez от университета в Аликанте, Испания на тема “Separation techniques: past, present and future” - сертификат

Проучване на възможностите за определяне на селен в кръвен серум чрез ICP-OES
Проучване на възможностите за определяне на селен и арсен чрез MP-AES

Подготовка на реферат на тема хидридна генерация.

Участие в семинар на тема:
"Приложение на масспектралните техники при определянето на биоактивни вещества“, ПУ „Паисий Хилендарски“, гр. Пловдив, 19.10.2017

Участие с постер „Определяне на As чрез MSIS-HG-MP-AES с използване на L-цистеин като прередуктор“ в „Дни на науката 2017” на СУБ-Пловдив. 02-03.11.2017

Участие с устен доклад с тема „MP-AES определяне на As чрез хидридна генерация“ - четвъртата научна конференция за студенти, докторанти и млади учени "Предизвикателства в Химията", Пловдив, 10-11.11. 2017

Част от изследванията са представени в лекциите на научния ръководител доц. Кметов:
“The role of method validation in the environmental analysis” - семинар на Аквахим „Най-новите постижения в анализа на околна среда с използването на LC-MS/MS“ София, 09-11-2017
“The role of measurement uncertainty in chemical analysis”- конференцията 30 години обучение по химия в ЮЗУ „ Неофит Рилски“, Благоевград, 19-22.10.2017

II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛНА РАБОТА

Разработване и оптимизиране на параметрите на аналитичен метод на : Определяне на остатъчен въглерод в кръвен серум при различни условия на киселинна минерализация чрез MP-AEC
Проведени са експерименти за влиянието на формата на присъствие на As върху чувствителността при аналитични методи (MP-AEC, ICP-OES)
Проведени са експерименти за оптимизиране на аналитичния сигнал при определяне на селен и арсен чрез ICP-OES и MP-AEC.
Оптимизиране на условията на прередукция на As (V) с L-цистеин:
оптималната концентрация на HCl и L-цистеин при прередукция и на разтвора внесен в спектрометъра; оптималната концентрация на NaOH, $NaBH_4$ при генериране на арсин.

Изследване влиянието на съпътстващите елементи при масово съотношение 1:10 и 1:50 (аналит : добавен елемент) след прередукция с L-цистеин.

Оптимизиране на инструментални параметри за хидридно генериране на арсин: скорост на поток на носещ газ, позиция на наблюдение, обемна скорост на пробен поток и $NaBH_4$ поток
Тестове за отлъчване на матрицата и преконцентриране на AsIII и AsV чрез LaIII след етап на прередукция и последващо им определяне чрез MP-AES

III. ПЕДАГОГИЧЕСКА ДЕЙНОСТ

Провеждане на упражнения, аналитична химия с инструментални методи на анализ, подготовка за колоквиум със студенти:
- Молекулярна биология, Бакалаври, редовна форма на обучение, първи курс, 1а група- 30 часа. (03.2017-05.2017)
- Екология и опазване на околната среда, Бакалаври, редовна форма на обучение, първи курс, 1^{в} група - 30 часа.

Подготовка и провеждане на упражнения по аналитична химия 1^{ва} част, бакалаври, 2^{ри} курс, Екология на биотехнологичните производства – (30 часа,октомври-декември 2017)

Съдействие при провеждане на упражнения”Определяне на етилентиуреа (ЕТУ) в Манкозеб” (курс: Комбинирани хроматографски техники – магистри)-януари 2018

Докторант:

/ Мина Кирякова/

Научен ръководител:

/ доц. д-р Веселин Йорданов Кметов **/**

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Виолета Стефанова /

28.02.2018
гр. Пловдив

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия” , проведено на 14.03.2018 г., беше разгледано предложение за промяна на темата на дисертационния труд на редовен докторант Мина Тенева Кирякова от „***Подобряване на качеството на аналитичните резултати, чрез изчисляване на бюджета на неопределеност***“ на ***“Подобряване на аналитичните характеристики при хидридна генерация в комбинация с емисионна спектрометрия с микровълнова плазма”.***

Предложението бе обсъдено и прието единодушно (11 гласа „за“) от членовете на катедрения съвет.

Предлагам ФС на ХФ да утвърди промяната в темата на дисертационният труд на докторант Мина Кирякова.

Прилагам препис-извлечение от катедрения съвет.

15.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 14.03.2018

ПРОТОКОЛ №4

На 14.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11

Присъстват 11

Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:

1.Годишни отчети на докторантите в катедрата

2.Учебни въпроси

3.Текущи въпроси

По точка 1.3 от дневния ред беше предложена промяна на темата на докторант Мина Тенева Кирякова

От: „Подобряване качеството на аналитичните резултати чрез изчисляване на бюджета на неопределеност”

На: „Подобряване на аналитичните характеристики при хидридна генерация в комбинация с емисионна спектрометрия с микровълнова плазма”.

Предложението се обсъди и след гласуване се прие с 11 гласа „за”.

16.03.20178 Протоколчик:

/П. Балабанова/

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра Аналитична химия и компютърна химия, проведено на 16.03.2018 г., беше разгледано предложение за програма за **изпит по специалността от индивидуалния план на редовен докторант *Мария Василева Френкева*** по докторантска програма *Аналитична химия.* Предложената програма е изготвена от научния ръководител проф. дн Пламен Пенчев и е съобразена с темата на дисертационния труд.

След обсъждане катедреният съвет единодушно подкрепи програмата с 11 гласа „за“.

Предлагам на ФС на ХФ да обсъди и утвърди предложената учебна програма*.*

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокола на катедрения съвет;
2. Разработената ***програма за изпит по специалността на редовен докторант Мария Френкева***.

16.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 16.03.2018

ПРОТОКОЛ №5

На 16.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11
Присъстват 11
Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:
1.Годишни отчети на докторантите в катедрата
2.Учебни въпроси
3.Кадрови въпроси
4.Текущи въпроси

По точка 2 от дневния ред беше обсъден конспект за докторантски минимум на докторант Мария Василева Френкева.

След дискусия конспектът беше приет с 11 гласа „за”.

16.03.2017 Протоколчик:

/П. Балабанова/

ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ
"ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

КАТЕДРА "АНАЛИТИЧНА ХИМИЯ и
КОМПЮТЪРНА ХИМИЯ"

КОНСПЕКТ ЗА ДОКТОРАНТСКИ МИНИМУМ

За докторант **Мария Василева Френкева**

- Тема на дисертационния труд „**Отнасяне на вибрационни и ЯМР спектри на органични съединения**", утвърдена от ФС, протокол № 186 от 31.01.2017 година.
- Дата на записване в докторантура : 01.03.2017 година, със заповед № Р33-671 от 16.02. 2017 година. Срок за завършване на докторантурата 01.03.2020 година
- Област на висше образование: „4. Природни науки, математика и информатика", професионално направление: „4.2. Химически науки", докторска програма: „Аналитична химия"

1. ЯМР спектроскопия: физични основи, константа на екраниране, химично отместване, константа на спин-спиново взаимодействие и други параметри на спектрите.
2. Техника на ЯМР експеримента. Стационарна и импулсна техника.
3. Протонен ЯМР: спектри от нулев, първи и втори порядък. Спинови системи AX, AMX, AX_2, AX_3, A_2X_3, AB, AA'XX', AA'BB'.
4. Алгоритъм за анализ на AX и AB спин-спиновите системи.
5. ^{13}C-ЯМР спектроскопия. Видове ^{13}C-ЯМР спектри и параметри, свързани тях.
6. Влияние на изотопите на въглерода, кислорода, азота, флуора, хлора и брома върху протонните ЯМР спектри. ЯМР спектроскопия на нуклиди, различни от ^{1}H и ^{13}C.
7. Фактори, влияещи на химичното отместване в ^{1}H- и ^{13}C-ЯМР спектри. Използване на химичното отместване за разкриване на структурата на химичните съединения.
8. Специални теми от ЯМР: релаксация, динамични ефекти, химична и магнитна еквивалентност, спектри на хирални молекули, влияние на разтворителя и температурата.
9. Двумерни ЯМР спектри. Аналитичен аспект на ^{1}H-^{1}H-COSY, HMQC, HSQC, HMBC и NOESY-спектри.
10. Теория на вибрационните спектри. Използване на симетрия за класификация на нормалните трептения. Приложение за молекулата на етена.
11. Теория на вибрационните спектри. Изчисляване на честотите линейна триатомна молекула със симетрия $D_{\infty h}$.
12. Теория на вибрационните спектри. Изчисляване на честотите нелилинейна триатомна молекула със симетрия C_{2v} с помощта на метода на нормалния координатен анализ.
13. Отнасяне на честотите на вибрационните ивици чрез сравняване със спектри на изотопно заместени аналози.
14. Методи за компютърна интерпретация на вибрационна и ЯМР спектрална информация и отнасяне на вибрационните ивици, както и сигналите в ЯМР спектрите.
15. Интерпретационно търсене в спектрални библиотеки от напълно отнесени ^{13}C-ЯМР спектри. Алгоритъм за разпъване (изграждане) на подструктурите. Сравнение с метода на Бремзер [9].
16. Адитивни схеми за предсказване на химичното отместване в ^{1}H- и ^{13}C-ЯМР спектри. Изчисляване на инкрементите. Предимства и ограничения. Други методи за предсказване на химичното отместване в ^{1}H- и ^{13}C-ЯМР спектри.

Литература

1. Eberhard Breitmaier. Structure Elucidation By NMR In Organic Chemistry: A Practical Guide. John Wiley & Sons, Ltd., 2002.
2. Joseph B. Lambert, Eugene P. Mazola. NMR Spectroscopy. Pearson Eduaction Inc., 2001.
3. Harald Gunter. NMR-Spektroscopie: Grundlagen, Konzepte und Anwendung der Protonen und Kohlenstoff-13 Kernresonanz-Spektroscopie in der Chemie. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 1992. (Същата книга в превод на руски на PDF).
4. Р. Борисова; Основи на химичния анализ. Изд. „Водолей“, 2009.
5. Ст. Спасов, М. Арнаудов. Приложение на спектроскопията в органичната химия, Изд. "Наука и изкуство", София, 1978.
6. Ст. Спасов, Л. Каменов. Ядрен магнитен резонанс в органичната химия, Изд. "Наука и изкуство", София, 1973.
7. Shelley C. A.; Munk M. E. Computer Prediction of Substructures from C-13 Nuclear Magnetic Resonance Spectra. Anal. Chem., 1982, 54, 516-521.
8. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул. Изд. „Наука“, Москва, 1972.
9. Bremser, W. Importance of Multiplicities and Substructures for Evaluation of Relevant Spectral Similarities for Computer-Aided Interpretation of C-13 Nmr-Spectra. *Fresenius Z. Anal. Chem*. **1977**, *286*, 1-13.
10. Plamen N. Penchev, Klaus-Peter Schulz, and Morton E. Munk; INFERCNMR: A ^{13}C NMR Interpretive Library Search System. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 52, 1513−1528 (2012).

Ръководител катедра:

/ доц. д-р Кирил Костов Симитчиев **/**

Научни ръководители: . . . . . .

1. Проф. д.н. Пламен Николов Пенчев

. . . . . .

2. Доц. д-р Марин Нейков Маринов

До Декана на ХФ

при ПУ “Паисий Хилендарски”

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено на 16.03.2018 г, беше обсъдено осигуряването на учебните занятия за втори семестър. Във връзка с това бе предложено да се привлече хоноруван преподавател за провеждане на упражнения по дисциплината „***Клинични анализи***“ за студенти от III-ти курс от бакалавърската специалност *Медицинска Химия*.

Катедреният съвет единодушно прие (11 гласа „за“) и предлага на Факултетния съвет да одобри ***д-р Деляна Давчева,*** която понастоящем е асистент по Клинична лаборатория в Медицински Университет – Пловдив, като хоноруван преподавател за водене на 45 часа упражнения, със заплащане 10 лв./час, по дисциплината „***Клинични анализи“,*** за специалност *Медицинска химия.*

Прилагам препис-извлечение от катедрения съвет.

16.03.2018 г. Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение
от заседание на катедра
”Аналитична химия и КХ”
от 16.03.2018

ПРОТОКОЛ №5

На 16.03.2018 се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”.

Общ състав 11
Присъстват 11
Необходим брой за положителен избор 7

Дневен ред:

1. Годишни отчети на докторантите в катедрата
2. Учебни въпроси
3. Кадрови въпроси
4. Текущи въпроси

По точка 3 от дневния ред беше обсъдено предложение да се назначи като хоноруван преподавател д-р Деляна Давчева за водене на 45 часа упражнения по дисциплината „Клинични анализи“, за специалност Медицинска химия.

След дискусия предложението беше прието с 11 гласа “за”.

16.03.2018 Протоколчик:
/П. Балабанова/

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,

Колектив от катедрата е подготвил ръкопис на ръководство за лабораторни упражнения по неорганична химия. На заседание на катедрения съвет, състоял се на 13.03.2018 г., за рецензент на ръкописа бе избран проф. дхн. Димитър Тодоровски и бе обсъден хонорар за изготвяне на рецензията в размер на 250 лв., за сметка на катедрата.

Моля да внесете във ФС на ХФ за утвърждаване решението на катедрения съвет.

Приложение:
Препис от протокол №163/13.03.2018 г.

14.03.2018 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 13.03.2018 г.

Протокол № 163

На 13.03.2018 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра „Обща и неорганична химия с методика на обучението по химия“.
Състав на катедрения съвет 7.
Присъстват 7: доц д-р Ваня Лекова, доц. д-р Йорданка Димова, доц. д-р Петя Маринова, гл. ас. д-р Йорданка Стефанова, гл. ас. д-р Антоанета Ангелачева, гл. ас. д-р Галя Тончева, гл. ас. д-р Кирила Стойнова.

от дневния ред по т. 2. Учебни въпроси:
2.4. Избор на рецензент на ръкопис „Ръководство за лабораторни упражнения по неорганична химия“ и определяне на възнаграждението за изготвяне на рецензия.

Доц. Лекова предложи за рецензент проф. дхн Димитър Тодоровски, като поясни, че има неговото съгласие да се запознае с ръкописа и изготви рецензия.
Членовете на катедрения съвет подкрепиха предложението за избор на рецензент.
Доц. Лекова постави за обсъждане размера на възнаграждението за изготвяне на рецензията, което ще е за сметка на катедрата.
Доц. Маринова предложи хонорар в размер на 200 лв.
Доц. Димова обясни, че за правописни и пунктуационни грешки на учебно помагало от 150 стр. са платени 200 лв., а тук се касае за възнаграждение на интелектуален труд.
Доц. Димова предложи 250 лв.
Катедреният съвет се обедини около предложението, хонорара за проф. дхн Тодоровски по изготвяне на рецензия да бъде в размер на 250 лв.
Предложението за хонорар от 250 лв. бе прието със 7 гласа „за“.

13.03.2018 г. Протоколчик:
Пловдив /Милена Славова/