ПРЕДЛОЖЕНИЕ
за Държавни изпитни комисии
за ОКС „бакалавър”
през 2022 година

I. Специалност “Химия” - редовно и задочно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 20 юли и 20 септември 2022 год.

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

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

II. Специалност “Медицинска химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 19 юли и 19 септември 2022 год.

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

1. Проф. д-р Гинка Антова
2. Проф. д-р Илиян Иванов
3. Доц. д-р Петя Маринова
4. Доц. д-р Кирил Симитчиев
5. Доц. д-р Румяна Бакалска
6. Доц. д-р Нина Димчева
7. Доц. д-р Георги Патронов
8. Гл. ас. д-р Димитър Божилов

III. Специалност “Компютърна химия” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 21 юли и 21 септември 2022 год.

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

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Кирил Симитчиев
3. Доц. д-р Стела Статкова-Абегхе
4. Доц. д-р Мария Стоянова
5. Доц. д-р Георги Патронов
6. Доц. д-р Мария Ангелова-Ромова
7. Доц. д-р Николай Кочев
8. Гл. ас. д-р Деяна Георгиева
9. Гл. ас. д-р Димитър Божилов

IV. Специалност “Химия с маркетинг” - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 21 юли и 21 септември 2022 год.

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

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Кирил Симитчиев
3. Доц. д-р Стела Статкова-Абегхе
4. Доц. д-р Мария Стоянова
5. Доц. д-р Георги Патронов
6. Доц. д-р Мария Ангелова-Ромова
7. Доц. д-р Теофана Димитрова
8. Гл. ас. д-р Деяна Георгиева
9. Гл. ас. д-р Димитър Божилов

V. Специалност "Анализ и контрол" - редовно обучение

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 21 юли и 21 септември 2022 год.

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

1. Доц. д-р Ваня Лекова
2. Доц. д-р Кирил Симитчиев
3. Доц. д-р Стела Статкова-Абегхе
4. Доц. д-р Мария Стоянова
5. Доц. д-р Георги Патронов
6. Доц. д-р Мария Ангелова-Ромова
7. Гл. ас. д-р Деяна Георгиева
8. Гл. ас. д-р Димитър Божилов
9. Гл. ас. д-р Станимир Манолов

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

Изпит по химия и защита на дипломни работи - 20 юли и 20 септември 2022 год.

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

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

ПРЕДЛОЖЕНИЕ
за Държавни изпитни комисии
за ОКС „магистър”
през 2022 година

I. Специалност „Спектрохимичен анализ” – задочно обучение на 20 септември и 26 октомври 2022 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 „Фармацевтична химия” – задочно обучение на 22 юли и 30 септември 2022 год.

Председател: Доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов

Членове:
1. Проф. Илиян Иванов Иванов
2. Проф. д-р Гинка Атанасова Антова
3. Доц. д-р Мария Костадинова Стоянова
4. Гл. ас. д-р Антония Георгиева Илиева
5. Гл. ас. д-р Димитър Георгиев Божилов

III. Специалност „Хранителна химия” – редовно и задочно обучение на 22 юли и 30 септември 2022 год.

Председател: Доц. д-р Пламен Ангелов Ангелов

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

IV. Специалност „Химия и екология” – задочно обучение на 21 септември и 20 октомври 2022 год.

Председател: Проф. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:
1. Доц. д-р Георги Иванов Патронов
2. Проф. д-р Диана Атанасова Кирин
3. Доц. д-р Виолета Миленкова Стефанова
4. Гл. ас. д-р Мариана Филипова Шопова

V. Специалност „Обучението по химия в училище“ – редовно и задочно обучение на 22 юли и 27 септември 2022 год.

Председател: Проф. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:

1. Доц. д-р Ваня Димитрова Лекова
2. Доц. д-р Йорданка Петрова Стефанова
3. Доц. д-р Антоанета Анастасова Ангелачева
4. Елена Тодорова Божинова-Стефанова – учител по химия (I ПКС)

Предложение

за комисия за провеждане на държавен изпит за допълнителна професионална квалификация „Учител по химия” на 22 юли и 27 септември 2022 год., в състав:

Председател: Проф. д-р Гинка Атанасова Антова

Членове:

1. Доц. д-р Ваня Димитрова Лекова
2. Доц. д-р Йорданка Петрова Стефанова
3. Доц. д-р Антоанета Анастасова Ангелачева
4. Елена Тодорова Божинова-Стефанова – учител по химия (I ПКС)

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 26.01.2022 г., бяха обсъдени и единодушно приети (10 гласа „за") следните учебни програми:

- Учебна програма по избираемата дисциплината „***Анализ на лекарствени средства***" за магистърска програма „Фармацевтична химия", редовно обучение (30/0/30);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***Анализ на лекарствени средства*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия ", задочно обучение (15/0/15);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***QSAR– моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия", редовно обучение (30/0/0);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***QSAR– моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия", задочно обучение (15/0/0);

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

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

27.01.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

доц. д-р Кирил Симитчиев

Препис-извлечение от заседание
на катедрения съвет на катедра
"Аналитична химия и компютърна химия"
от 26.01.2022

ПРОТОКОЛ № 2

На 26.01.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 12

Присъстват : 10

Отсъстват: ас. Ася Христозова – командировка във Виена, Австрия и проф.дн Пламен Пенчев - поради здравословно причини

Дневен ред:

1. Избор на ръководител на катедрата
2. Учебни въпроси
3. Текущи въпроси

По точка 2.1 бяха обсъдени следните учебни програми:

- Учебна програма по избираемата дисциплината „***Анализ на лекарствени средства***" за магистърска програма „Фармацевтична химия", редовно обучение (30/0/30);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***Анализ на лекарствени средства*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия ", задочно обучение (15/0/15);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***QSAR– моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия", редовно обучение (30/0/0);
- Учебна програма по избираемата дисциплината „***QSAR– моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност*** " за магистърска програма „Фармацевтична химия", задочно обучение (15/0/0).

Програмите бяха гласувани и приети с 10 гласа „за".

26.01.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

П Л О В Д И В С К И У Н И В Е Р С И Т Е Т
"П А И С И Й Х И Л Е Н Д А Р С К И"
България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централа: (032) 261 261
Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Фармацевтична химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Анализ на лекарствени средства

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Магистър

Година на обучение

първа

Семестър

I

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Доц. д-р Кирил Симитчиев

Учебни резултати за курса

Анотация

Целта на курса по Анализ на лекарствени средства е студентите от МП Фармацевтична химия да придобият теоретични и практични познания относно химичните изпитвания, свързани с осигуряване качеството и безопасността на фармацевтичните продукти. Провежданото обучение обхваща знания и умения, които са необходими за прилагане на настоящата действаща фармакопея в Р. България (Европейската фармакопея). Курсът включва запознаване с основните методи за предварителна подготовка на лекарствени проби за анализ. Задълбочено се разглеждат набор от нехроматографски методи за анализ на лекарствени вещества – както класически (титриметрия), така и съвременни инструментални техники, включващи методите на атомната и молекулната спектроскопия. Приложението на посочените аналитични методики е ориентирано в две основни направления – определяне на активни лекарствени съставки и анализ на нежелани (регулирани) съпътстващи компоненти, влизащи в състава на търговски фармацевтични продукти.

Курсът по Анализ на лекарствени средства надгражда задължителната дисциплина „Хроматографски методи във фармацевтичния анализ“, разглеждаща хроматографските подходи за качествена идентификация и количествено определяне на компонентите на фармацевтични продукти. Същевременно придобитите знания в настоящия курс допълват материала изучаван в дисциплината „Фармацевтично законодателство“, по отношение на запознаване със структурата на Европейската фармакопея като нормативен документ и регулаторните органи на национално и международно ниво, имащи отношение към контрола на качеството и безопасността на лекарствените средства.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- Изискванията, регламентирани в нормативни документи, необходими за осигуряване на качеството на фармацевтичните продукти;
- Предимствата и ограниченията на класическите аналитични методи, прилагани за изследване на лекарствени вещества: методи за качествена идентификация, базирани на образуването на цветни комплексни съединения или малкоразтворими вещества; титриметрични методи;
- Предимствата и ограниченията на нехроматографските инструментални методи, прилагани за анализ на лекарствени вещества: пламъково атомно-емисионна спектрометрия; атомно-абсорционна спектрометрия с пламъков и електротермичен атомизатор; оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма; масспектрометрия с индуктивно свързана плазма; вибрационна спектроскопия; електронна спектроскопия в ултавиолетовата и видимата област на спектъра и органична масспектрометрия;
- Как да изберат подходящ метод за анализ на активно лекарствено вещество или контролиран съпътстващ компонент.

2. *Ще могат*:

- Да приготвят реактиви и стандартни разтвори, необходими за провеждането на анализ на лекарствени вещества;

- Да намират, тълкуват, реализират и верифицират методики за анализ, описани в Европейската фармакопея;
- Да провеждат процедури на разтваряне на търговски фармацевтични продукти;
- Да изолират активни лекарствени вещества от съпътстващи компоненти;
- Да прилагат класически аналитични методи (титриметрия) и съвременни инструментални техники (атомна и молекулна спектроскопия, органична масспектрометрия) за анализ на фармацевтични продукти;
- Да изчисляват и представят резултатите от измерване с нужната метрологична компетентност;
- Да осъществят контрол на качеството на лекарствени средства в съответствие със съществуващите нормативни документи.

Начин на преподаване

Аудиторно: 60 ч.

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

Извънаудиторно: 90 ч

- Самостоятелна подготовка
- Курсова работа (индивидуални самостоятелни задачи)
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: ***Хроматографски методи във фармацевтичния анализ*** и ***Фармацевтично законодателство.***

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да са запознати с основните групи лекарствени вещества, прилагани в хуманната медицина;
- Да са усвоили общоприетите термини и концепции на химичната метрология, както и основните статистически подходи за обработка на резултатите от химичните изпитвания;
- Да са запознати с основните процедури на предварителна подготовка на проби - разтваряне, разреждане, разделяне и концентриране;
- Да са запознати с принципите на химичния анализ, провеждан чрез титриметрични методи, атомна и молекулна спектроскопия;

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Стабилност на лекарствените продукти, Фотохимична стабилност на ЛВ

Съдържание на курса

Курсът по Анализ на лекарствени средства обхваща следните основни тематични направления – (1) запознаване с действащите нормативни документи за регулация на лекарствените вещества в Р България и Европейския Съюз; (2) изучаване на подходи за предварителна подготовка на фармацевтичните проби; (3) запознаване с методите за качествена идентификация на активни лекарствени компоненти и гранични изпитвания на онечиствания съгласно изискванията на Европейската фармакопея; (4) приложение на класически аналитични методи (титриметрия) и съвременни нехроматографски инструментални техники (атомна и молекулна спектроскопия, органична масспектрометрия) за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества и контрол на нежелани съпътстващи компоненти. В курсът задълбочено се разглеждат критичните моменти в

методите за анализ (пречещи влияния), дискутира се подходящия избор на калибрационна стратегия при прилагането на инструменталните техники, обръща се внимание за необходимостта от валидиране или верифициране на използвания метод.

Упражненията са разработени с цел студентите да придобият умения и опит за решаването на практически задачи, свързани с контрола на качеството на фармацевтичните продукти: избор на подходящ аналитичен метод и оптимизиране на условията за провеждането му. Студентите разработват конкретни аналитични задачи, усвояват основните методи и техники за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества, зададени в Европейската фармакопея и застъпени в лекционния курс. В упражненията, касаещи молекулна спектроскопия и органична масспектрометрия, е включена и интерпретация на спектри, налични от спектрални бази данни.

Изготвянето на протоколи не е задължително, но студентите се поощряват да имат собствена лабораторна тетрадка за записки, която при тяхно желание може периодично да се проверява и заверява от преподавател.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Анализ на лекарствени средства

тема	часове
1. Контрол на качеството, ефективността и безопасността на фармацевтичните продукти – нормативни документи и контролни органи в Република България и Европейския Съюз. Функция на Международния съвет за хармонизиране на техническите изисквания за фармацевтични продукти за хуманна употреба (ICH). Систематизация на методите за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества съгласно Европейската фармакопея.	2
2. Дозови форми на лекарствените вещества. Химичен състав на помощните вещества – пълнители, свързващи материали, смазочни материали, дезинтегратори, лекарствени обвивки, консерванти, стабилизатори, оцветители и овкусители.	1
3. Подходи за качествено идентифициране на активни лекарствени компоненти и гранични изпитвания по отношение на онечиствания от съпътстващи вещества.	1
4. Предварителна подготовка на лекарствените проби за анализ. Методи за разделяне и концентриране на активните вещества в многокомпонентни фармацевтични продукти или на активното вещество от съпътстващите компоненти – приложение на течно-течната и твърдофазната екстракция.	4
5. Титриметрични методи, използвани за контрол на активни вещества и примесни компоненти. Киселинно-основно титруване (ацидиметрия и алкалиметрия във водна и неводна среда). Редоксиметрия (цериметрия, йодометрия/йодиметрия). Комплексометрия. Утаечно титруване (аргентометрия). Метод на Karl-Fischer за определяне на водно съдържание.	4
6. Разработване и валидиране на метод за анализ на лекарствени вещества. Избор на калибрационна стратегия при инструментален анализ – външна калибрация, метод на стандартната добавка, метод на вътрешния стандарт.	2

7. Инфрачервена спектроскопия в средната ИЧ област и Раман спектроскопия – приложение за качествена идентификация и определяне на полиморфната форма на лекарствени вещества.	2
8. Инфрачервена спектроскопия в близката ИЧ област на спектъра (NIR) – аналитични характеристики на метода и приложения при анализа на лекарствени вещества.	2
9. Спектрофотометрия във видимата и ултравиолетовата област (електронна UV-VIS и флуоресцентна спектроскопия). Подходи за количествен анализ на еднокомпоментни и многокомпонентни лекарствени продукти.	4
10. Приложение на пламъковата атомно-емисионна (FAES), пламъковата атомно-абсорбционна (FAAS) и електротермичната атомно-абсорбционна спектрометрия (ETAAS) за елементен анализ. Определяне на активни компоненти и онечиствания във фармацевтични продукти.	2
11. Плазмена спектрометрия (оптико-емисионна: ICP-OES и масспектрометрия: ICP-MS). Възможности на инструменталните методите за многоелементен следови анализ – контрол на онечиствания от химични елементи в лекарствените вещества.	2
12. Органична масспектрометрия – йонизационни източници и мас-филтърни системи. Хибридни техники (газова и течна хроматография в комбинация с масспектрометрична детекция), използвани при анализа на лекарствени вещества.	4
Общ брой часове:	**30**

Форми на текущ контрол:

Възлагане и проверка на индивидуални самостоятелни задачи в рамките на учебния семестър.

Б/ Упражнения по Анализ на лекарствени вещества - I част

тема	часове
I Занятие – Екстракционни методи за подготовка на лекарствени вещества, предхождащи инструменталния анализ – изолиране на сулфаметоксазол и триметоприм от таблетки ко-тримоксазол.	5
II Занятие – Титрувални методи за количествен анализ на активни лекарствени вещества – определяне на ацетилсалицилова киселина и метамизол натрий в таблетки за перорална употреба.	5
III Занятие – Приложение на Инфрачервената и Раман спектроскопия за идентификация на лекарствени вещества – качествена идентификация на парацетамол в таблетки за перорална употреба.	5
IV Занятие – Електронна спектроскопия (Спектрофотометрия) – приложение за количествен анализ на активни вещества в лекарствените средства – определяне на съдържанието на парацетамол в крайни фармацевтични продукти чрез използване на литературни данни за специфична абсорбируемост.	5

V Занятие - Пламъкова атомна емисия и пламъкова атомна абсорбция – приложение за количествен елементен анализ (съдържание на Na и K в инфузионни разтвори; микроминерали в ефервесцентни витамини; Zn в Zn-инсулинови суспензии).	5
VI Занятие – Възможности на органичната масспектрометрия за анализ на лекарствени вещества – интерпретация на спектри, регистрирани с единични и тандемни мас-филтърни системи.	5
Общ брой часове:	**30**

В/ Самостоятелна подготовка:

На студентите ще бъдат възложени индивидуални самостоятелни задачи (**курсова работа**), обхващащи материала от учебното съдържание на дисциплината. Списъкът с индивидуални задачи за всеки студент ще бъде оповестен до 3-та седмица на семестъра. Курсовата работа трябва да се предаде от студентите в писмен вид до 14-та седмица от семестъра.

Техническо осигуряване на обучението

- Лаборатории, снабдени с оборудване за провеждане на количествен титриметричен и спектрален анализ, в това число: поточна система за дейонизирана вода; нагревателни уреди; индивидуални комплекти за провеждане на титриметричен анализ; набор от делителни фунии; установки за дестилация; центрофуга; сушилня; клатачна машина; вортекс хомогенизатор; пневматични пипети; реактиви за качествен и количествен анализ с клас "химически чисти за анализ".
- Тегловна лаборатория: 4 бр. аналитични везни (с прецизност до 0.0001g) и 1 техн. везна.
- Катедрата е оборудвана със съвременна апаратура за атомен спектрален анализ: (1) FAES/FAAS Thermo Scientific iCE 3000, (2) ETAAS Perkin Elmer Zeeman 5100, (3) MP-AES Agilent 4200, (4) ICP-OES Thermo Scientific iCAP 6300 Duo, (5) ICP-MS Agilen 7700.
- Апаратура за електронна спектроскопия в УВ-Вид област: 2 броя спектрофотометри ONDA UV-30 SCAN.
- Апаратура за вибрационна спектроскопия: (1) VERTEX 70 FT-IR spectrometer (Bruker Optics) и (2) Раман спектрометър RAM II (Bruker Optics), окомплектован допълнително с микроскоп RamanScope (Bruker Optics).
- Апаратура за хроматографски и масспектрометричен анализ: GC-MS/MS TSQ 9000 Thermo Scientific.
- Потенциометри и pH-метри - 2 бр.
- Уред за определяне на температурата на топене SMP10 – 1 бр.
- На разположение на студентите са 4 бр. компютърни системи и MS Office софтуер за обработка на аналитичната информация и изготвяне на анализни протоколи.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
К. Симитчиев	Свитък лекционен курс - разпечатка и електронна версия	https://students.uni-plovdiv.net/	2021
	European Pharmacopoeia, 10th ed.	European Directorate for the Quality of Medicines & HealthCare	2020
M. Akash, K. Rehman	Essentials of Pharmaceutical Analysis	Springer	2020

D. Watson	Pharmaceutical analysis, 5th ed.	Elsevier	2020
A. Moffat, M. Osselton, B. Widdop	Clark's analysis of drug and poisons	Pharmaceutical Press	2011
Р. Борисова	Основи на химичния анализ	Водолей	2009
Г. Андреев.	Молекулна Спектроскопия	Изд. ПУ	2010

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка лекционна тема от програмата се представя като мултимедийна презентация, което спомага за по-доброто онагледяване на разглеждания теоретичен материал. Студентите предварително имат възможност да получат в електронен формат свитъка със слайдове от следващите лекции. Студентите разработват курсова работа, която се оценява и участва във формирането на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта учебни и научно-изследователски лаборатории. По време на упражненията студентите придобиват нужните умения за успешната реализация на широк набор от методи за анализ на лекарствени вещества под методическото ръководство на асистентите.

Предвидени са 6 задължителни упражнения по Анализ на лекарствени средства с времетраене 5 часа. Занятията включват:

- теоретични разяснения; решаване на изчислителни задачи; интерпретация на спектри, налични от база данни
- експериментална част - индивидуални или групови аналитични задачи
- обработка и тълкуване на получените резултати

Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат и помощни материали за самостоятелна подготовка по дисциплината) са достъпни за студентите (след регистрация чрез оторизираща система на ПУ: е-портал) на интернет страницата на ПУ на адрес: http://students.uni-plovdiv.net/

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма е включена курсовата работа, зададена като самостоятелни задачи на студентите, която се предава в писмена форма и се оценява.

Крайният семестриален изпит се провежда под формата на пасивен тест (30 въпроса), включващ всички теми от учебната програма. Всеки въпрос има пет отговора, от които само един е верен.

Крайната оценка по дисциплината се формира от 2 компонента: резултат от самостоятелна курсова работа и резултат от крайния тестови изпит. Оценката се изчислява по следната формула:

30% от оценката на курсовата работа + 70% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставянето на оценката.

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Кирил Симитчиев.....

П Л О В Д И В С К И У Н И В Е Р С И Т Е Т
"П А И С И Й Х И Л Е Н Д А Р С К И"
България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централа: (032) 261 261
Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Фармацевтична химия (задочно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

Анализ на лекарствени средства

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Магистър

Година на обучение

първа

Семестър

I

Брой ECTS кредити

5

Име на лектора

Доц. д-р Кирил Симитчиев

Учебни резултати за курса

Анотация

Целта на курса по Анализ на лекарствени средства е студентите от МП Фармацевтична химия да придобият теоретични и практични познания относно химичните изпитвания, свързани с осигуряване качеството и безопасността на фармацевтичните продукти. Провежданото обучение обхваща знания и умения, които са необходими за прилагане на настоящата действаща фармакопея в Р. България (Европейската фармакопея). Курсът включва запознаване с основните методи за предварителна подготовка на лекарствени проби за анализ. Задълбочено се разглеждат набор от нехроматографски методи за анализ на лекарствени вещества – както класически (титриметрия), така и съвременни инструментални техники, включващи методите на атомната и молекулната спектроскопия. Приложението на посочените аналитични методики е ориентирано в две основни направления – определяне на активни лекарствени съставки и анализ на нежелани (регулирани) съпътстващи компоненти, влизащи в състава на търговски фармацевтични продукти.

Курсът по Анализ на лекарствени средства надгражда задължителната дисциплина „Хроматографски методи във фармацевтичния анализ“, разглеждаща хроматографските подходи за качествена идентификация и количествено определяне на компонентите на фармацевтични продукти. Същевременно придобитите знания в настоящия курс допълват материала изучаван в дисциплината „Фармацевтично законодателство“, по отношение на запознаване със структурата на Европейската фармакопея като нормативен документ и регулаторните органи на национално и международно ниво, имащи отношение към контрола на качеството и безопасността на лекарствените средства.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- Изискванията, регламентирани в нормативни документи, необходими за осигуряване на качеството на фармацевтичните продукти;
- Предимствата и ограниченията на класическите аналитични методи, прилагани за изследване на лекарствени вещества: методи за качествена идентификация, базирани на образуването на цветни комплексни съединения или малкоразтворими вещества; титриметрични методи;
- Предимствата и ограниченията на нехроматографските инструментални методи, прилагани за анализ на лекарствени вещества: пламъково атомно-емисионна спектрометрия; атомно-абсорционна спектрометрия с пламъков и електротермичен атомизатор; оптико-емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма; масспектрометрия с индуктивно свързана плазма; вибрационна спектроскопия; електронна спектроскопия в ултавиолетовата и видимата област на спектъра и органична масспектрометрия;
- Как да изберат подходящ метод за анализ на активно лекарствено вещество или контролиран съпътстващ компонент.

2. *Ще могат*:

- Да приготвят реактиви и стандартни разтвори, необходими за провеждането на анализ на лекарствени вещества;

- Да намират, тълкуват, реализират и верифицират методики за анализ, описани в Европейската фармакопея;
- Да провеждат процедури на разтваряне на търговски фармацевтични продукти;
- Да изолират активни лекарствени вещества от съпътстващи компоненти;
- Да прилагат класически аналитични методи (титриметрия) и съвременни инструментални техники (атомна и молекулна спектроскопия) за анализ на фармацевтични продукти;
- Да изчисляват и представят резултатите от измерване с нужната метрологична компетентност;
- Да осъществят контрол на качеството на лекарствени средства в съответствие със съществуващите нормативни документи.

Начин на преподаване

Аудиторно: 30 ч.

- Лекции (15 часа),
- Лабораторни упражнения (15 часа)

Извънаудиторно: 120 ч

- Самостоятелна подготовка
- Курсова работа (индивидуални самостоятелни задачи)
- Консултации

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: ***Хроматографски методи във фармацевтичния анализ*** и ***Фармацевтично законодателство.***

Студентите трябва да имат познания по следните теми:

- Да са запознати с основните групи лекарствени вещества, прилагани в хуманната медицина;
- Да са усвоили общоприетите термини и концепции на химичната метрология, както и основните статистически подходи за обработка на резултатите от химичните изпитвания;
- Да са запознати с основните процедури на предварителна подготовка на проби - разтваряне, разреждане, разделяне и концентриране;
- Да са запознати с принципите на химичния анализ, провеждан чрез титриметрични методи, атомна и молекулна спектроскопия;

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Стабилност на лекарствените продукти, Фотохимична стабилност на ЛВ

Съдържание на курса

Курсът по Анализ на лекарствени средства обхваща следните основни тематични направления – (1) запознаване с действащите нормативни документи за регулация на лекарствените вещества в Р България и Европейския Съюз; (2) изучаване на подходи за предварителна подготовка на фармацевтичните проби; (3) приложение на класически аналитични методи (титриметрия) и съвременни нехроматографски инструментални техники (атомна и молекулна спектроскопия) за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества и контрол на нежелани съпътстващи компоненти. В курсът задълбочено се разглеждат критичните моменти в методите за анализ (пречещи влияния), дискутира се подходящия избор на калибрационна стратегия при прилагането на инструменталните

техники, обръща се внимание за необходимостта от валидиране или верифициране на използвания метод.

Упражненията са разработени с цел студентите да придобият умения и опит за решаването на практически задачи, свързани с контрола на качеството на фармацевтичните продукти: избор на подходящ аналитичен метод и оптимизиране на условията за провеждането му. Студентите разработват конкретни аналитични задачи, усвояват основните методи и техники за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества, зададени в Европейската фармакопея и застъпени в лекционния курс. В упражненията, касаещи молекулна спектроскопия е включена и интерпретация на спектри, налични от спектрални бази данни.

Изготвянето на протоколи не е задължително, но студентите се поощряват да имат собствена лабораторна тетрадка за записки, която при тяхно желание може периодично да се проверява и заверява от преподавател.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции Анализ на лекарствени средства

тема	часове
1. Контрол на качеството, ефективността и безопасността на фармацевтичните продукти – нормативни документи и контролни органи в Република България и Европейския Съюз. Функция на Международния съвет за хармонизиране на техническите изисквания за фармацевтични продукти за хуманна употреба (ICH). Систематизация на методите за качествен и количествен анализ на лекарствени вещества съгласно Европейската фармакопея.	2
2. Предварителна подготовка на лекарствените проби за анализ. Методи за разделяне и концентриране на активните вещества в многокомпонентни фармацевтични продукти или на активното вещество от съпътстващите компоненти – приложение на течно-течната и твърдофазната екстракция.	3
3. Титриметрични методи, използвани за контрол на активни вещества и примесни компоненти. Киселинно-основно титруване (ацидиметрия и алкалиметрия във водна и неводна среда). Метод на Karl-Fischer за определяне на водно съдържание.	2
4. Разработване и валидиране на метод за анализ на лекарствени вещества.	1
5. Инфрачервена спектроскопия в средната ИЧ област и Раман спектроскопия – приложение за качествена идентификация и определяне на полиморфната форма на лекарствени вещества.	2
6. Инфрачервена спектроскопия в близката ИЧ област на спектъра (NIR) – аналитични характеристики на метода и приложения при анализа на лекарствени вещества.	1
7. Електронна UV-VIS спектроскопия. Подходи за количествен анализ на еднокомпоментни и многокомпонентни лекарствени продукти.	2

8. Приложение на пламъковата атомно-емисионна (FAES) и пламъковата атомно-абсорбционна (FAAS) спектрометрия за елементен анализ. Определяне на активни компоненти и онечиствания във фармацевтични продукти.	1
9. Плазмена спектрометрия (оптико-емисионна: ICP-OES и масспектрометрия: ICP-MS). Възможности на инструменталните методите за многоелементен следови анализ – контрол на онечиствания от химични елементи в лекарствените вещества.	1
Общ брой часове:	**15**

Форми на текущ контрол:

Възлагане и проверка на индивидуални самостоятелни задачи в рамките на учебния семестър.

Б/ Упражнения по Анализ на лекарствени вещества - I част

тема	часове
I Занятие – Приложение на Инфрачервената и Раман спектроскопия за идентификация на лекарствени вещества – качествена идентификация на парацетамол в таблетки за перорална употреба.	5
II Занятие – Електронна спектроскопия (Спектрофотометрия) – приложение за количествен анализ на активни вещества в лекарствените средства – определяне на съдържанието на парацетамол в крайни фармацевтични продукти чрез използване на литературни данни за специфична абсорбируемост.	5
III Занятие - Пламъкова атомна емисия и пламъкова атомна абсорбция – приложение за количествен елементен анализ (съдържание на Na и K в инфузионни разтвори; микроминерали в ефервесцентни витамини; Zn в Zn-инсулинови суспензии).	5
Общ брой часове:	**15**

В/ Самостоятелна подготовка:

На студентите ще бъдат възложени индивидуални самостоятелни задачи (**курсова работа**), обхващащи материала от учебното съдържание на дисциплината. Курсовата работа трябва да се предаде от студентите в писмен вид до края на учебния семестър.

Техническо осигуряване на обучението

- Лаборатории, снабдени с оборудване за провеждане на количествен титриметричен и спектрален анализ, в това число: поточна система за дейонизирана вода; нагревателни уреди; индивидуални комплекти за провеждане на титриметричен анализ; набор от делителни фунии; установки за дестилация; центрофуга; сушилня; клатачна машина; вортекс хомогенизатор; пневматични пипети; реактиви за качествен и количествен анализ с клас “химически чисти за анализ“.
- Тегловна лаборатория: 4 бр. аналитични везни (с прецизност до 0.0001g) и 1 техн. везна.
- Катедрата е оборудвана със съвременна апаратура за атомен спектрален анализ: (1) FAES/FAAS Thermo Scientific iCE 3000, (2) ETAAS Perkin Elmer Zeeman 5100, (3) MP-AES Agilent 4200, (4) ICP-OES Thermo Scientific iCAP 6300 Duo, (5) ICP-MS Agilen 7700.

- Апаратура за електронна спектроскопия в УВ-Вид област: 2 броя спектрофотометри ONDA UV-30 SCAN.
- Апаратура за вибрационна спектроскопия: (1) VERTEX 70 FT-IR spectrometer (Bruker Optics) и (2) Раман спектрометър RAM II (Bruker Optics), окомплектован допълнително с микроскоп RamanScope (Bruker Optics).
- Потенциометри и pH-метри - 2 бр.
- Уред за определяне на температурата на топене SMP10 – 1 бр.
- На разположение на студентите са 4 бр. компютърни системи и MS Office софтуер за обработка на аналитичната информация и изготвяне на анализни протоколи.

Библиография

Автор	***Заглавие***	***Издателство***	***Година***
К. Симитчиев	Свитък лекционен курс - разпечатка и електронна версия	https://students.uni-plovdiv.net/	2021
	European Pharmacopoeia, 10th ed.	European Directorate for the Quality of Medicines & HealthCare	2020
M. Akash, K. Rehman	Essentials of Pharmaceutical Analysis	Springer	2020
D. Watson	Pharmaceutical analysis, 5th ed.	Elsevier	2020
A. Moffat, M. Osselton, B. Widdop	Clark's analysis of drug and poisons	Pharmaceutical Press	2011
Р. Борисова	Основи на химичния анализ	Водолей	2009
Г. Андреев.	Молекулна Спектроскопия	Изд. ПУ	2010

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка лекционна тема от програмата се представя като мултимедийна презентация, което спомага за по-доброто онагледяване на разглеждания теоретичен материал. Студентите предварително имат възможност да получат в електронен формат свитъка със слайдове от следващите лекции. Студентите разработват курсова работа, която се оценява и участва във формирането на крайната оценка по дисциплината.

Лекциите са придружени с практически курс - упражнения, провеждани в обзаведени за целта учебни и научно-изследователски лаборатории. По време на упражненията студентите придобиват нужните умения за успешната реализация на най-често използваните методи за анализ на лекарствени вещества под методическото ръководство на асистентите.

Предвидени са 3 задължителни упражнения по Анализ на лекарствени средства с времетраене 5 часа. Занятията включват:

- теоретични разяснения; решаване на изчислителни задачи; интерпретация на спектри, налични от база данни
- експериментална част - индивидуални или групови аналитични задачи
- обработка и тълкуване на получените резултати

Всички учебни материали (лекционен курс в електронен формат и помощни материали за самостоятелна подготовка по дисциплината) са достъпни за студентите (след регистрация чрез оторизираща система на ПУ: е-портал) на интернет страницата на ПУ на адрес: http://students.uni-plovdiv.net/

Методи и критерии на оценяване

В рамките на учебната програма е включена курсовата работа, зададена като самостоятелни задачи на студентите, която се предава в писмена форма и се оценява.

Крайният семестриален изпит се провежда под формата на пасивен тест (30 въпроса), включващ всички теми от учебната програма. Всеки въпрос има пет отговора, от които само един е верен.

Крайната оценка по дисциплината се формира от 2 компонента: резултат от самостоятелна курсова работа и резултат от крайния тестови изпит. Оценката се изчислява по следната формула:

30% от оценката на курсовата работа + 70% от оценката от семестриалния тест.

Студентите имат право да се информират за резултатите от писмените си работи и да се запознаят с мотивите за поставянето на оценката.

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

доц. д-р Кирил Симитчиев.....

П Л О В Д И В С К И У Н И В Е Р С И Т Е Т
"П А И С И Й Х И Л Е Н Д А Р С К И"
България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централа: (032) 261 261
Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Фармацевтична химия (редовно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

QSAR – моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Магистър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

3

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Учебни резултати за курса

Анотация

Дисциплината "QSAR – моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност" запознава студентите с класическите и съвременните подходи за откриване на количествена връзка между химическа структура и биологична активност (популярна като QSAR). QSAR подходите са ключов инструмент на химичната информатика при търсене и прогнозиране на нови лекарствени средства и биологично активни вещества на база свойствата на вече известните такива. QSAR моделирането предлага набор от алтернативни решения на проблема, основани на анализи на химическата структура от една страна и от друга - на различни молекулни дескриптори като хидрофобност, електронни свойства, топология, геометрични дескриптори, молекулна рефракция, стерични ефекти и др.

Курсът разглежда класическите уравнения на Хамет, популярния метод на Ханч, изграден върху данните за електронните и хидрофобните свойства на молекулата и методите базирани на адитивни схеми. Също така в курса са представени съвременните тенденции на химичната информатика за 2D-QSAR, 3D-QSAR и 4D-QSAR моделиране. В курса се акцентира на добрите практики при създаване и валидиране на QSAR модели в съответствие с официалните изисквания на OECD. За да усвоят методите QSAR, в началото на курса студентите ще бъдат запознати с основните методи на химичната информатика: структурно представяне, изчисляване на различни класове молекулни дескриптори, избор на подходящи множества от дескриптори и основните начини за създаване на модели въз основа на избраните дескриптори.

Придобитите умения за компютърно моделиране съответстват на съвременните индустриални стандарти прилагани при откриването, дизайна, синтеза и производството на нови химични вещества с практическо приложение.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- основните методи за структурно представяне и съответстващите им класове молекулни дескриптори
- основните подходи за линейно и нелинейно моделиране
- класически методи за QSAR анализ: уравнения на Хамет, метод на Ханч
- съвременни методи за 2D-QSAR, 3D-QSAR и 4D-QSAR
- добрите практики при създаване и валидиране на QSPR/QSAR модели

2. *Ще могат*:

- да създават линейни и нелинейни модели на физико-химични свойства и биологична активност;
- да осъществяват класически QSPR/QSAR анализ

Начин на преподаване

Аудиторно: 30 ч.

- Лекции (30 часа)
-

Извънаудиторно: 60 ч.

- Самостоятелна подготовка
- Консултации
- Курсова работа

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: ***Органична химия, Математика***

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основни познания по органична химия и органичен синтез
- основни знания по математика
- основни познания по химична информатика са желателни

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 20 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- редактори за структурна информация: IsisDraw, ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D стрктурите на химични съединения,
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- PCModel 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- CACTVS – система за представяне и обработка на стуктурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- Jupyter Notebook – система за електронни „тефтери“ за поточна обработка на информация, базирана на скриптове
- JBSMM - софтуерна система за изчисляване на молекулни дескриптори и създаване на QSAR/QSPR модели
- Weka – система за статистическо моделиране
- KNIME – аналитична платформа за обработка на данни
- ToxTree - софтуер за моделиране на токсичност
- Ambit2 – софтуерна система по химична информатика, която поддържа търсене в химични бази данни, обработка и анализ на структурна информация, QSAR/QSPR моделиране и др.

Съдържание на курса

Курсът по QSAR моделиране дава задълбочени знания на студентите за класическите QSAR подходи и съвременните методи на химичната информатика при моделиране на биологична активност въз основа на топологични и геометрични молекулни дескриптори. Курсът е базиран на добрите практики за създаване и валидиране на QSAR модели препоръчани в официалната документация на OECD. В лекционния материал се разглеждат метода на Ханч и съвременните подходи за 2D, 3D и 4D QSAR моделиране. В началото на курса е включен блок лекции въвеждащи основополагащите принципи на химичната информатика: представяне и обработката на структурна информация, изчисляване на молекулни дескриптори, избор на работни извадки от химически обекти и подходящи дескриптори, създаване и статистическо валидиране на модели.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции QSAR - моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

Тема	часове
1. Въведение в химичната информатика I част.	5
Основни химически обекти. Представяне на химични структури и химични реакции. Топологични представяния и линейни нотации. 3D структурни представяния. Моделиране на молекулна геометрия. Молекулни повърхности. Конформационен анализ.	
2. Въведение в химичната информатика II част.	5
Молекулни дескриптори – обща класификация. Конституционни дескриптори. Топологични индекси. Геометрични дескриптори. Електоростатични дескриптори. Автокорелационни дескриптори. Регресионни методи. Адитивни схеми.	
3. Основни етапи при разработка на лекарства. Приложения на Химичната информатика при разработката на лекарства. SRC - корелации ‘структура – отклик’.	2
4. Основни понятия и принципи на съвременните концепции за биологична активност. Фактори, влияещи върху активността на съединението. Принципи на измерването и представянето на биологичната активност.	2
5. Класически QSAR методи I част.	3
Уравнение на Хамет. Интерпретация на електронните ефекти при органичните реакции. Приложения на уравненията на Хамет. Ограничения и подобрения на уравненията на Хамет.	
6. Класически QSAR методи II част.	3

Хидрофобен параметър и значението му за биологичната активност. Коефициенти на разпределение. Методи за определяне на LogP и pKa. Отчитане на стеричните ефекти. Подход на Тафт. Стеримолни параметри. Молекулната рефракция като стеричен параметър.

7. Класически QSAR методи III част. 2

Методология на Ханч и Фуджита. Адитивен подход на Фрий-Уилсън. Подход на Топлис.

8. Съвременни нормативни изисквания за QSAR моделиране залегнали в документацията на OECD. Валидиране на QSAR модел. Определяне на област на приложимост на QSAR модел. 3

9. 2D-QSAR методи. Нелинейни методи. 3D-QSAR методи. Метод CoMFA - сравнителен анализ на молекулните полета. nD-QSAR методи. 2

10. Лигандно и рецептърно базирани подходи при разработката на лекарства. Приложения на метода на молекулната динамика. Свързване на молекули (docking). Профил на лиганд. Виртуален скрининг. 3

Общ брой часове: 30

Б/ Упражнения QSAR - моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и множество задания за домашна работа.
Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и QSAR/QSPR модели и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
Н. Кочев	Свитък лекционен курс - електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		

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

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал.

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

http://students.uni-plovdiv.bg/

Методи и критерии на оценяване

Практическите аспекти на усвояването на преподавания материал се определят от оценката на курсовата работа на студентите.

Дисциплината приключва с изпит – тест с активни и пасивни въпроси, включващ всички теми от учебната програма.

Оценката се изчислява по следната формула:

25% от оценката на Курсовата работа + 75% от оценката от семестриалния тест

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....

П Л О В Д И В С К И У Н И В Е Р С И Т Е Т
"П А И С И Й Х И Л Е Н Д А Р С К И"
България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централа: (032) 261 261
Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

УЧЕБНА ПРОГРАМА

Факултет

ХИМИЧЕСКИ

Катедра

Аналитична химия и компютърна химия

Професионално направление (на курса)

4.2 Химически науки

Специалност

Фармацевтична химия (задочно обучение)

ОПИСАНИЕ

Наименование на курса

QSAR – моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

Код на курса

Тип на курса

Избираем

Равнище на курса (ОКС)

Магистър

Година на обучение

първа

Семестър

II

Брой ECTS кредити

3

Име на лектора

Доц. д-р Николай Кочев

Учебни резултати за курса

Анотация

Дисциплината "QSAR – моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност" запознава студентите с класическите и съвременните подходи за откриване на количествена връзка между химическа структура и биологична активност (популярна като QSAR). QSAR подходите са ключов инструмент на химичната информатика при търсене и прогнозиране на нови лекарствени средства и биологично активни вещества на база свойствата на вече известните такива. QSAR моделирането предлага набор от алтернативни решения на проблема, основани на анализи на химическата структура от една страна и от друга - на различни молекулни дескриптори като хидрофобност, електронни свойства, топология, геометрични дескриптори, молекулна рефракция, стерични ефекти и др.

Курсът разглежда класическите уравнения на Хамет, популярния метод на Ханч, изграден върху данните за електронните и хидрофобните свойства на молекулата и методите базирани на адитивни схеми. Също така в курса са представени съвременните тенденции на химичната информатика за 2D-QSAR, 3D-QSAR и 4D-QSAR моделиране. В курса се акцентира на добрите практики при създаване и валидиране на QSAR модели в съответствие с официалните изисквания на OECD. За да усвоят методите QSAR, в началото на курса студентите ще бъдат запознати с основните методи на химичната информатика: структурно представяне, изчисляване на различни класове молекулни дескриптори, избор на подходящи множества от дескриптори и основните начини за създаване на модели въз основа на избраните дескриптори.

Придобитите умения за компютърно моделиране съответстват на съвременните индустриални стандарти прилагани при откриването, дизайна, синтеза и производството на нови химични вещества с практическо приложение.

Компетенции

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

1. *Ще знаят*:

- основните методи за структурно представяне и съответстващите им класове молекулни дескриптори
- основните подходи за линейно и нелинейно моделиране
- класически методи за QSAR анализ: уравнения на Хамет, метод на Ханч
- съвременни методи за 2D-QSAR, 3D-QSAR и 4D-QSAR
- добрите практики при създаване и валидиране на QSPR/QSAR модели

2. *Ще могат*:

- да създават линейни и полиномиални модели на физико-химични свойства и биологична активност
- да осъществяват класически QSPR/QSAR анализ

Начин на преподаване

Аудиторно: 15 ч.

- Лекции (15 часа)
-

Извънаудиторно: 75 ч.

- Самостоятелна подготовка
- Консултации
- Курсова работа

Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: ***Органична химия, Математика***

Студентите трябва да имат познания и умения по следните теми:

- основни познания по органична химия и органичен синтез
- основни знания по математика
- основни познания по химична информатика са желателни

Препоръчани избираеми програмни компоненти

Техническо осигуряване на обучението

- 2 компютърни зали: 20 бр. компютри свързани в обща вътрешна мрежа
- сървъри: общо 4 специализирани компютърни системи
- ОС Windows (академични лицензи)
- MS Office (академични лицензи)
- редактори за структурна информация: IsisDraw, ACDLABS
- RasMol – специализирана програма за визуализация на 3D стрктурите на химични съединения,
- TINKER - специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- PCModel 9.1 специализирана програма за моделиране с метода на молекулната механика.
- CACTVS – система за представяне и обработка на стуктурна информация и физикохимични свойства
- R - система за статистическо моделиране
- Jupyter Notebook – система за електронни „тефтери“ за поточна обработка на информация, базирана на скриптове
- JBSMM - софтуерна система за изчисляване на молекулни дескриптори и създаване на QSAR/QSPR модели
- Weka – система за статистическо моделиране
- KNIME – аналитична платформа за обработка на данни
- ToxTree - софтуер за моделиране на токсичност
- Ambit2 – софтуерна система по химична информатика, която поддържа търсене в химични бази данни, обработка и анализ на структурна информация, QSAR/QSPR моделиране и др.

Съдържание на курса

Курсът по QSAR моделиране дава задълбочени знания на студентите за класическите QSAR подходи и съвременните методи на химичната информатика при моделиране на биологична активност въз основа на топологични и геометрични молекулни дескриптори. Курсът е базиран на добрите практики за създаване и валидиране на QSAR модели препоръчани в официалната документация на OECD. В лекционния материал се разглеждат метода на Ханч и съвременните подходи за 2D, 3D и 4D QSAR моделиране. В началото на курса е включен блок лекции въвеждащи основополагащите принципи на химичната информатика: представяне и обработката на структурна информация, изчисляване на молекулни дескриптори, избор на работни извадки от химически обекти и подходящи дескриптори, създаване и статистическо валидиране на модели.

Тематично съдържание на учебната дисциплина

А/Лекции QSAR - моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

Тема	часове
1. Въведение в химичната информатика I част.	3
Основни химически обекти. Представяне на химични структури и химични реакции. Топологични представяния и линейни нотации. 3D структурни представяния. Моделиране на молекулна геометрия.	
2. Въведение в химичната информатика II част.	2
Молекулни дескриптори – обща класификация. Регресионни методи. Адитивни схеми.	
3. Основни етапи при разработка на лекарства. Приложения на Химичната информатика при разработката на лекарства.	1
4. Основни понятия и принципи на съвременните концепции за биологична активност. Фактори, влияещи върху активността на съединението.	1
5. Класически QSAR методи I част.	2
Уравнение на Хамет. Интерпретация на електронните ефекти при органичните реакции. Приложения на уравненията на Хамет.	
6. Класически QSAR методи II част.	2
Хидрофобен параметър и значението му за биологичната активност. Коефициенти на разпределение. Методи за определяне на LogP и pKa. Отчитане на стеричните ефекти. Молекулната рефракция като стеричен параметър.	

7. Класически QSAR методи III част.	1
Метод на Ханч. Адитивен подход на Фрий-Уилсън.	
8. Съвременни нормативни изисквания за QSAR моделиране залегнали в документацията на OECD. Валидиране на QSAR модел.	1
9. 2D-QSAR методи. Нелинейни методи. 3D-QSAR методи. Метод CoMFA - сравнителен анализ на молекулните полета.	1
10. Лигандно и рецептърно базирани подходи при разработката на лекарства. Приложения на метода на молекулната динамика. Виртуален скрининг.	1
Общ брой часове:	**15**

Б/ Упражнения QSAR - моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност

В/ Самостоятелна подготовка:

Подготовката на студентите се допълва посредством консултации с лектора и множество задания за домашна работа.
Към самостоятелната работа на студентите са предвидени изчислителни и практически задачи от темите залегнали в учебната програма, създаване на презентации по определена тематика, обработка на химична информация свързана с текущи научни проекти в университета, създаване на бази данни и QSAR/QSPR модели и др. Материалите и софтуера за самостоятелна подготовка са достъпни от специализираните web страници на курса, както и от допълнителни ресурси с химически бази данни и други информационни източници по Интернет.

Библиография

Автор	*Заглавие*	*Издателство*	*Година*
Н. Кочев	Свитък лекционен курс - електронен курс на адрес students.uni-plovdiv.net		
T. Engel, J. Gasteiger	Chemoinformatics Basic Concepts and Methods	Wiley-VCH Verlag GmbH	2018
J. Gasteiger (Ed.)	Handbook of Chemoinformatics Vol. 1, 2, 3, 4.	WILEY-VCH Verlag GmbH	2003
J. Gasteiger, T. Engel	Chemoinformatics a textbook	Wiley-VCH Verlag GmbH	2003
R. Todeschini, V. Consonni;	Handbook of Molecular Descriptors	WILEY-VCH Verlag GmbH & Co	2000

В. Симеонов	Принципи на обработка на химичните данни	Издателство СУ, София	2000
A. Leach, V. Gillet	An Introduction To Chemoinformatics	Springer	2007
D. Massart, B. Vandenginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman.	Chemometrics: a textbook	Elsevier	1988

Планирани учебни дейности и методи на преподаване

Всяка тема от програмата се поднася като мултимедийна презентация, което позволява студентите да получават нагледна представа за разглеждания теоретичен материал.

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

http://students.uni-plovdiv.bg/

Методи и критерии на оценяване

Практическите аспекти на усвояването на преподавания материал се определят от оценката на курсовата работа на студентите.

Дисциплината приключва с изпит – тест с активни и пасивни въпроси, включващ всички теми от учебната програма.

Оценката се изчислява по следната формула:

25% от оценката на Курсовата работа + 75% от оценката от семестриалния тест

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

Език на преподаване

Български

Изготвил описанието

Доц. д-р Николай Кочев.....

Химически Факултет
ул. "Цар Асен " № 24, гр. Пловдив – 4000
Тел.: 359 32 / 261 402
Факс: 359 32 / 261 403
chemistry@uni-plovdiv.net
argon.uni-plovdiv.bg

Катедра О Р Г А Н И Ч Н А Х И М И Я

ДО
ДОЦ. Д-Р ВЕСЕЛИН КМЕТОВ
ДЕКАН
НА ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ
ПУ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"
ПЛОВДИВ

Д О К Л А Д

от проф. д-р Илиян Иванов

ръководител катедра Органична химия

УВАЖАЕМИ ДОЦ. КМЕТОВ,

Моля да внесете във ФС на Химически факултет предложение за утвърждаване на *Програма за изпит по специалността за прием в докторска програма Органична химия*.

Приложено, препис от протокол от заседание на КС на кат. Органична химия и *Програма за изпит по специалността за прием в докторска програма Органична химия*.

С уважение,

.....
ПРОФ. Д-Р ИЛИЯН ИВАНОВ
Ръководител катедра Органична химия

ПРЕПИС-ИЗВЛЕЧЕНИЕ

от протокол **№ 341/25.02.2022 год.**

заседание на КС

на катедра“Органична химия”

ПУ „П. Хилендарски”

Протокол № 341

На 25.02.2022 год. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Органична химия” в синхронна дистанционна форма с линк: https://meet.jit.si/KCOX

Общ състав на катедрен съвет - 8. Присъстват 8: проф. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Стела Статкова-Абегхе, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Стоянка Атанасова, гл. ас. д-р Димитър Божилов, гл. ас. д-р Йордан Стремски и гл. ас. д-р Мина Тодорова. Отсъстващи: няма.

Присъстващи извън състава на кат. Органична химия: гл. ас. д-р Станимир Манолов.

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни.
2. Текущи.

По т.1 от дневния ред ръководителят на катедрата проф. д-р Илиян Иванов внесе за обсъждане пред членовете на КС предложение за утвърждаване на програма за изпит по специалността за прием в докторска програма *Органична химия*.

След обсъждане от членовете на КС, се премина към гласуване.
Гласували: 8; За: 8; Против: 0; Въздържали се: 0;

Решение:

КС предлага на ФС да утвърди представената програма за изпит по специалността за прием в докторска програма *Органична химия*.

25.02.2022 год. Протоколчик:

гр. Пловдив (гл. ас. д-р Й. Стремски)

Катедра О Р Г А Н И Ч Н А Х И М И Я

ПРОГРАМА ЗА ИЗПИТ ПО СПЕЦИАЛНОСТТА ЗА ПРИЕМ В ДОКТОРСКА ПРОГРАМА *ОРГАНИЧНА ХИМИЯ*

1. Строеж на органичните съединения. Подходи на квантовата теория за обяснение на образуването на химичните връзки в органичните молекули - локализирани и делокализирани пи-връзки. Основни характеристики на химичните връзки – енергия, дължина, валентен ъгъл и полярност. Електронни ефекти в молекулите на органичните съединения.

2. Стереоизомерия на органичните съединения. Конфигурационна изомерия - хиралност и оптическа активност. Енантиомерия и σ-диастереоизомерия. Стереохимични формули и номенклатури: проекционни формули на Фишер, *R,S*- и *D, L* – номенклатура. *π*-Диастереоизомерия.

3. Алкани. Химични свойства: реакции на халогениране, нитриране, сулфониране и окисление. Механизъм на радикаловите заместителни реакции - електронна структура, начини на генериране и стабилност на радикали. Циклоалкани – циклопропан и циклохексан структура и конформационна изомерия. Методи за получаване на алкани и циклоалкани.

4. Ненаситени въглеводороди – алкени и алкини. Структура и реактивоспособност. Реакции на електрофилно присъединяване: присъединяване на халогени, халогеноводороди, вода. Нуклеофилно присъединяване и *CH*-киселинни свойства на алкините. Окисление на алкени. Механизъм на радикалово присъединяване. Методи за получаване на ненаситени въглеводороди.

5. Алкадиени. Класификация, структура и реактивоспособност. Реакции на 1,2- и
1,4-присъединяване при 1,3-диени. Методи за получаване на диени.

6. Ароматни въглеводороди. Критерии за ароматност - правило на Хюкел. Примери за бензоидни и небензоидни ароматни системи. Механизъм и особености на електрофилните заместителни реакции: халогениране, нитриране, сулфониране, алкилиране и ацилиране по Фридел-Крафтс.

7. Ароматни въглеводороди. Ориентиращ ефект на заместителите при реакциите на електрофилно заместване**.** Реакции в страничната верига на алкиларени – халогениране, окисление. Нафтален, антрацен, фенантрен – структура и свойства. Методи за получаване на арени**.**

8. Халогенопроизводни на въглеводородите. Класификация, номенклатура и изомерия при халогенопроизводните. Методи за получаване на халогенопроизводни.
9. Химични свойства на алкилхалогениди - реакции на нуклеофилно заместване и елиминиране. Механизъм и стереохимия на моно- и бимолекулно заместване. Дехидрохалогениране - *E1* и *E2* механизъм. Дехалогениране.

10. Хидроксилни производни на въглеводородите. Сравнително разглеждане на структура и реактивоспособност на алкохоли, феноли, ди- и триоли. Киселинно- основни свойства. Реакции на заместване и елиминиране. Получаване на естери на неорганични и органични киселини. Окисление до карбонилни съединения и карбоксилни киселини. Методи за получаване на хидроксилни производни.

11. Карбонилни съединения. Структура и реактивоспособност на алдехиди и кетони. Реакции на нуклеофилно присъединяване към карбонилна група – механизъм на взаимодействие с вода, амоняк, алкохоли, амини, циановодород и Гринярови реактиви.

12. Карбонилни съединения. *CH*-киселинни свойства на алдехиди и кетони – енолизация. Реакции при α-С-атом спрямо карбонилната група – алдолна кондензация, реакция на Каницаро. Редукция и окисление на карбонилни съединения. Методи за получаване на мастни и ароматни алдехиди и кетони.

13. Карбоксилни киселини. 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 на мастни, ненаситени и ароматни карбоксилни киселини.

14. 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, хофманово разпадане. Методи за получаване.

15. 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 и свойства.

16. Хетероциклени съединения с петатомен пръстен. Фуран, пирол и тиофен – ароматна структура и химични свойства: основност и *NH*-киселинност, електрофилни заместителни реакции, присъединителни реакции. Индол – строеж и свойства. Методи за получаване. Примери за природни и ситетични биологично-активни хетероциклени съединения.

17. Хетероциклени съединения съдържащи шестатомен пръстен – ароматна структура и химични свойства: основност, електрофилни заместителни реакции, нуклеофилни реакции. Методи за получаване. Примери за природни и ситетични биологично-активни хетероциклени съединения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Петров Г. *Органична химия*, УИ-"Св.-Климент-Охридски", 2018.
2. Clayden, J., Greeves, N., Warren, S. and Wothers, P. Organic chemistry, Oxford university presss, New York, 2001.
3. K. Peter C. Vollhardt, Neil E. Schore *Organic Chemistry Structure and Function* , 8e, W. H. Freeman and Company, 2018.
4. Francis A. Carey, Robert M. Giuliano, Neil T. Allison, Susan L. Bane *Organic Chemistry*, 11th Edition, McGraw-Hill Education, 2019.

22.02.2022 г.
Пловдив

Изготвил:…….

проф. д-р И. Иванов

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 22.02.2022 г., бе разгледан ***отчетът на задочен докторант Мария Василева Френкева за четвъртата година от докторантурата ѝ***. На заседанието присъства един от двамата научни ръководители на докторанта – проф. дн Пламен Пенчев. Проф. Пенчев запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от втория научен ръководител доц. д-р Марин Маринов, и предложи оценка за четвъртата година на докторантурата Мн. Добър (5). След обсъждане на представените резултати, отчетът и оценката на научните ръководители бяха единодушно приети с 11 гласа „за".

Моля ФС на ХФ да утвърди отчетът за четвъртата година от обучението на докторант Мария Василева Френкева с оценка Мн. Добър (5).

Прилагам:

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

23.02.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание на КС
на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"
от 22.02.2022

ПРОТОКОЛ № 4

На 22.02.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 12

Присъстват : 11, отсъства В. Паскалева - в часове

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.1 бе разгледан ***отчетът на задочен докторант Мария Василева Френкева за четвъртата година от докторантурата ѝ***. На заседанието присъства един от двамата научни ръководители на докторанта – проф. дн Пламен Пенчев. Проф. Пенчев запозна членовете на катедрата със становището си, утвърдено от втория научен ръководител доц. д-р Марин Маринов, и предложи оценка за четвъртата година на докторантурата Мн. Добър (5).

След обсъждане предложението беше гласувано и прието с 11 гласа „за".

23.02.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ

за периода 01.03.2021г. до 28.02.2022г.
на
Мария Василева Френкева,
задочен 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. Експериментална работа:

Отнесени са ^{1}H и ^{13}C ЯМР спекти на 28 α- и β-спирохидантоини. Данните са систамитизирани в Таблици 1-3.

Таблица 1. Спектрални данни от ^{1}H ЯМР спектри (DMSO-d_6, δ, ppm) на съединенията IIa-IIh и IIIa-IIIh

№		N^1-H	N^3-H	№		N^3-H
IIa		8.18	10.57	**IIIa**		8.98
IIb		8.64	10.78	**IIIb**		9.05
IIb.1	*α*	8.25	10.60	**IIIb.1**	α	10.56
	β	8.08	10.47		β	10.24
IIb.2	*α*	8.15	10.54	**IIIb.2**	α	11.33
	β	7.99	10.21		β	11.04
IIb.3	*α*	8.18	10.33	**IIIb.3**	α	11.52
	β	8.01	10.11		β	11.53
IIb.4	*α*	8.28	10.51	**IIIb.4**	α	11.50
	β	7.96	10.32		β	10.43
IIb.5	*α*	8.45	10.57	**IIIb.5**	α	10.40
	β	7.97	10.43		β	11.51
IIb.6	*α*	8.62	10.65	**IIIb.6**	α	10.49
	β	7.8	10.55		β	10.28
IIc		8.3	10.4	**IIIc**		11.72
IId		8.2	10.4	**IIId**		11.81
IIe		7.95	10.44	**IIIe**		11.94
IIf		10.59	12.33	**IIIf**		12.23
IIg		8.54	10.84	**IIIg**		12.92
IIh		8.38	10.78	**IIIh**		11.83

Таблица 2. Спектрални данни от ^{13}C ЯМР спектри (DMSO-d_6, δ, ppm) на съединенията IIIa-IIIh

№		C^2=O	C^4=O	spiro C^5-atom	acet. C=O
IIIa		157.4	180.7	59.8	168.8
IIIb		156.8	179.0	60.6	169.2
IIIb.1	*α*	157.5	178.7	66.4	170.0
	β	154.3	175.1	63.5	161.1
IIIb.2	*α*	158.1	179.5	64.7	169.3
	β	155.3	175.6	59.9	168.9
IIIb.3	*α*	156.8	179.2	62.4	169.2

	β	152.4	174.5	58.8	169.2
IIIb.4	*α*	156.5	178.9	61.1	168.8
	β	156.8	179.1	60.1	169.2
IIIb.5	*α*	156.6	178.8	61.1	169.2
	β	152.4	178.9	59.1	169.2
IIIb.6	*α*	157.9	179.4	60.7	169.1
	β	155.4	177.5	59.2	169.3
IIIc		157.1	179.9	66.6	169.0
IIId		158.4	180.3	65.4	168.8
IIIe		156.8	176.6	68.2	167.9
IIIf		157.7	171.2	74.6	167.4
IIIg		158.2	173.5	71.4	168.7
IIIh		154.5	175.2	75.0	168.5

Таблица 3. Систематични наименования на съединенията IIa-IIh и IIIa-IIIh

№	Systematic name
IIa	1,3-diazaspiro[4.4]nonane-2,4-dione
IIb	1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.1	6-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.2	7-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.3	8-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.4	8-ethyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.5	8-propyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIb.6	8-*tert*-butyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIc	1,3-diazaspiro[4.6]undecane-2,4-dione
IId	1,3-diazaspiro[4.7]dodecane-2,4-dione
IIe	1,3-diazaspiro[4.11]hexadecane-2,4-dione
IIf	spiro[fluorene-9,5'-imidazolidine]-2',4'-dione
IIg	3',4'-dihydro-2'*H*-spiro[imidazolidine-4,1'-naphthalene]-2,5-dione
IIh	2',3'-dihydrospiro[imidazolidine-4,1'-indene]-2,5-dione
IIIa	3-acetyl-1,3-diazaspiro[4.4]nonane-2,4-dione
IIIb	3-acetyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.1	3-acetyl-6-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.2	3-acetyl-7-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.3	3-acetyl-8-methyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.4	3-acetyl-8-ethyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.5	3-acetyl-8-propyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIb.6	3-acetyl-8-*tert*-butyl-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione
IIIc	3-acetyl-1,3-diazaspiro[4.6]undecane-2,4-dione
IIId	3-acetyl-1,3-diazaspiro[4.7]dodecane-2,4-dione
IIIe	3-acetyl-1,3-diazaspiro[4.11]hexadecane-2,4-dione
IIIf	3'-acetylspiro[fluorene-9,5'-imidazolidine]-2',4'-dione
IIIg	1-acetyl-3',4'-dihydro-2'*H*-spiro[imidazolidine-4,1'-naphthalene]-2,5-dione
IIIh	1-acetyl-2',3'-dihydrospiro[imidazolidine-4,1'-indene]-2,5-dione

II. Участие в конференция:

"IArcSAS" 1st International Architectural Sciences and Applications Symposium, 27-29.10.2021, Isparta, Turkey с постер на тема: Synthesis, characteration and antibacterial studies of new metal complexes with 2-thiouracil and its derivatives, S. Dimitrova, S. Tsoneva, M. Frenkeva, D. Blazheva, P. Dzhambazova, P. Marinova, P. Penchev.

III. Публикации:

Synthesis and characterization of N^3- acetyl derivatives of spirohydantoins, M. Marinov, M. Frenkeva, E. Naydenova, P. Penchev, N. Stoyanov, *Journal of Chemical Technology and Metallurgy, 57, 1, 2022*.

New Cu(II), Pd(II) and Au(III) complexes with 2-thiouracil: Synthesis, Characteration and Antibacterial Studies, P.Marinova, S. Tsoneva, M. Frenkeva, D. Blazheva, A. Slavchev, P. Penchev подготвена за списание *Russian Journal of General Chemistry*.

Докторант:.....

/ Мария Френкева /

Научни ръководители : .....

/ Проф. д.н. Пламен Пенчев /

.....

/Доц. д-р Марин Маринов /

28.02.2022 г.

Ръководител катедра:.....

/ Доц. д-р Кирил Симитчиев /

СТАНОВИЩЕ

за работата на Мария Френкева,
задочен докторант към катедра "Аналитична химия и Компютърна химия"
на Химически факултет за периода 01.03.2021г. до 28.02.2022г.от научните ръководители

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

През този период докторантката, както е отбелязала в нейния годишен отчет, е отнесла спектрите на няколко съединения и има едно участие в конференция и публикувана статия в научно списание, реферирано в Scopus. В отчета не е спомената написаната от докторантката статия с отнасянията на ^{1}H и ^{13}C ЯМР спектри на две новосинтезирани органични съединения. Публикуването и проверката на данните е забавена от П. Пенчев и редица обективни обстоятелства. Допълнително колектив от колеги завършваме работата по публикация за комплексните съединения на 2-тиоурацил с Pd^{2+}, Cu^{2+} и Au^{3+}, в която статия използваме отнасянията на спектрите на лиганда и съответните квантово-химични изчисления, извършени от докторантката.

Работата на Мария Василева Френкева за този период я оценяваме с Мн. Добър (5): тази оценка не е максималната, поради липсата на време за контакти с докторантката, която работи на постоянно място в химическа лаборатория в завод в гр. Пещера.

За четирите години на докторантурата Мария Френкева има публикувани три статии и участие в няколко конференции, ето защо ние научните ръководители предлагаме тя да бъде отчислена с право на защита.

Научни ръководители :

.....
Проф. д.н. Пламен Пенчев
/

.....
/ Доц. д-р Марин Маринов
/

Пловдив
21.2.2022 г.

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 22.02.2022 г., бе разгледан ***отчет от задочен докторант Мария Василева Френкева за дейностите и активностите, извършени в рамките на нейната докторантура***. В заседанието участва един от научните ръководители на докторанта – проф. дн Пламен Пенчев.

КС на КАХКХ, обсъди и единодушно прие (11 гласа „за") предложението на проф. дн Пламен Пенчев, утвърдено от втория научен ръководител доц. д-р Марин Маринов, за отчисляване с право на защита на задочен докторант Мария Френкева.

Моля ФС на ХФ да утвърди предложението докторант Мария Василева Френкева да бъде отчислена с право на защита.

Прилагам препис-извлечение от КС на КАХКХ.

23.02.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание на КС
на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"
от 22.02.2022

ПРОТОКОЛ № 4

На 22.02.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 12

Присъстват : 11, отсъства В. Паскалева - в часове

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.2 бе разгледан ***отчет от задочен докторант Мария Василева Френкева за дейностите и активностите, извършени в рамките на нейната докторантура***. В заседанието участва един от научните ръководители на докторанта – проф. дн Пламен Пенчев.

КС на КАХКХ обсъди предложението на проф. дн Пламен Пенчев, утвърдено от втория научен ръководител доц. д-р Марин Маринов, за отчисляване с право на защита на задочен докторант Мария Френкева.

Предложението беше гласувано и прието с 11 гласа „за".

23.02.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

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

Д О К Л А Д

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

Господин Декан,

На 23.02.2022 г. се състоя Катедрен съвет, на който беше разгледан годишния отчет за изпълнението на задачите за четвъртата година от докторантурата на Благо Спасов Чучков, задочен докторант към катедрата по докторска програма “Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати”.

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

След представяне на отчета и неговото обсъждане, членовете на катедрения съвет го приеха и гласуваха оценка: Мн. добър (5).

Прилагам препис от протокола на Катедрения съвет.

23.02.2022 г.

Ръководител катедра ХТ:
(доц. д-р М. Ангелова-Ромова)

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

Годишен отчет

на Благо Спасов Чучков
задочен докторант към катедра „Химична технология”
на Химически факултет
за четвъртата година от докторантурата

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

Изготвеният годишен отчет е съобразно индивидуалния план за четвъртата година от докторантурата (1.02.2021 г.до 1.02.2022 г.).

I. Експериментална работа, извършена по дисертационния труд

1. Определяне общото съдържание на стероли и техния индивидуален състав в липиди, изолирани от културални проби и от проби на крайни продукти с различна течливост

Спектрофотометричният метод за определяне на съдържание на стероли в масло се основава на количествено измерване на абсорбцията на цветни съединения с участие на стероли. Общото количество на стеролите в липиди, изолирани от от културални проби и крайни продукти с различна течливост е показан на таблица 1.

Таблица 1: Съдържание на стероли в липиди, изолирани от културална течност по време на биосинтеза на салиномицин и на липиди, изолирани от крайни продукти с различна течливост

Стероли в липиди от културална течност			Стероли в липиди от крайни продукти		
в 213ч. от процеса	в 405ч. от процеса	в края на процеса (490ч.)	с лоша течливост	с добра течливост	много добра течливост
0,8 ±0,1	1,1 ±0,2	0,7 ±0,2	0,5 ±0,1	1,0 ±0,2	0,6 ±0,1

Количеството на стероли в липидите се повишава с напредване на ферментационния процес от 0,8% до 1,1% в 405ч., а в края на процеса, достига стойност, която е близка до

тази на рапичното масло, използвано за хранителна среда (съдържание на стероли в маслото 0,6%). Данните ни показват че съдържанието на стероли в изолираните липиди, съдържащи се в крайни продукти с различна течливост варират в границите 0,5 – 1,0%, като в пробата с много добрата течливост количеството стероли е 0,6%. Съдържанието на стероли в тази проба е същото като в изходното масло. Промените в съдържанието на стероли по време на биосинтеза на салиномицин не са в голяма степен, както и тяхното съдържание в остатъчните липиди не оказва влияние върху течливостта на продукта.

Индивидуален стеролов състав

Индивидуалният състав на стероловата фракция е определена с помощта на газова хроматография. Данните за индивидуалния състав на свободните стероли, съдържащи се в липиди, изолирани от изследваните проби са представени в таблица 2.

Таблица 2. Стеролов състав на липиди, изолирани от културални течности и от крайни продукти, съдържащи салиномицин с различна течливост

Стероли, %	Стеролов състав %						
	на липиди от културална течност			на липиди от крайни продукти			Рапично масло
	в 213ч. от процеса	в 405ч. от процеса	в края на процеса	с лоша течливост (<80%)	с добра течливост (80%)	много добра течливост (>80%)	
Холестерол	-	0,3 ±0,1	0,1 ±0,1	-	-	-	-
Брасикастерол	2,5 ±0,1	5,2 ±0,2	4,4 ±0,2	5,3 ±0,2	6,0 ±0,2	5,8 ±0,2	10,5±0,1
Кампестерол	6,8 ±0,2	32,1 ±0,3	31,2 ±0,3	10,2 ±0,3	38,4 ±0,5	25,3 ±0,3	35,1±0,2
Стигмастерол	36,4 ±0,4	8,9 ±0,2	9,6 ±0,2	34,8 ±0,3	12,2 ±0,3	11,2 ±0,2	0,2±0,05
β - Ситостерол	54,3 ±0,5	52,7 ±0,5	53,4 ±0,5	49,7 ±0,5	41,4 ±0,4	57,7 ±0,5	53,4 ±0,5
Δ^5 – Авенастерол	-	0,6 ±0,1	1,2 ±0,1	-	-	-	0,8±0,1
Δ^7 – Авенастерол	-	0,2 ±0,1	0,1 ±0,1	-	2,0 ±0,1	-	-

Данните показват промените в стероловия състав по време на биосинтеза на салиномицин, както и стероловия състав на липидите, съдържащи се в крайните продукти с различна течливост. Значителни промени в стероловия състав се наблюдава по време на протичането на ферментационния процес. Количеството на стигмастерола и на кампестерола в липидите, изолирани от пробата от 213ч. е нарастнало неколкократно в сравнение с това в изходното рапично масло. При следващите две проследявания (405 ч. и в края на процеса), количеството на кампестерола е съизмеримо с това на изходното рапично масло, а количеството на стигмастерола е по-високо от това на рапичното масло (около 9,0%). Количеството на брасикастерола е около 2 до 3 пъти по-малко от това на изходния продукт, докато количеството на основния компонет на стеролите в рапичното масло, β-ситостеролът се запазва по време на ферментацията (около 50-55%). При данните от анализа на стероловия състав на липидите, изолирани от крайните продукти се вижда, че

съдържанието на основния компонент на стеролите варира от 41,4 до 57,7%, което е съизмеримо с количеството му в рапичното масло. Количеството на β - Ситостерол в липидите от пробата с най-добра течливост е най-високо, но дори и в пробата с лоша течливост е около 50,0%. Количеството на холестера в изолираните липиди и от трите проби е по-ниско от това на изходното масло, а количеството на стигмастерола е нарастнало драстично от 0,2% до 34,8% (от пробата с лоша течливост). Не може да кажем, че има определена зависимост между съдържанието на отделните стероли от липидите на крайните продукти и течливостта им. Количествата на индивидуалните стероли от липидите на пробите с добра и много добра течливост са от един порядък, докато в пробата с лоша течливост количеството на стигмастерола е три пъти по-голямо, а това на кампестерола – три пъти по-малко в сравнение с тези на първите две проби. Най-вероятно промените в стероловия състав не влия в голяма степен на проблема със слепването на частиците в продукта, т.е. респективно върху показателя течливост.

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

Фосфолипидите са изолирани чрез екстракция по Фолч. Индивидуалните фосфолипиди се разделят с помощта на двупосочна тънкослойна хроматография и се определят спектрофотометрично.

Получените данни за индивидуалния състав на фосфолипидите, изолирани от крайни продукти, съдържащи салиномицин с различна течливост са представени в таблица 3.

Таблица 3. Индивидуален фосфолипиден състав на липиди изолирани от крайни продукти с различна течливост

Фосфолипиди, %	Проби		
	с лоша течливост (<80%)	с добра течливост (80%)	много добра течливост (>80%)
Фосфатидилхолин	20,6 ±0,3	47,6 ±0,5	61,9 ±0,5
Фосфатидилетаноламин	55,7 ±0,5	29,7 ±0,3	3,7 ±0,1
Фосфатидилсерин	5,3 ±0,1	-	1,4 ±0,1
Лизофосфатидилхолин	11,0 ±0,2	22,7 ±0,3	31,6 ±0,4
Лизофосфатидилетаноламин	7,4 ±0,1	-	1,4 ±0,1

Фосфолипидите от пробите с добра и много добра течливост са с високо съдържание на фосдатидилхолин (съответно 61,9% и 47,6%,) и лизофосфатидилхолин (31,6% и 22,7%), докато липидите от пробата с лоша течливост съдържат същите фосфолипиди в количество съответно 20,6% и 11,0%. Наблюдава се точно обратната зависимост относно съдържанието на фосфатидилетаноламина - ниско съдържание в пробите с добра (29,7%) и много добра течливост (2,7%) и високо в пробата с лоша течливост (55,7%). Установени са минимални количества на фосфатидилсерин и на лизофосфатидилетаноламин в пробите с добра и много добра течливост. Следователно крайните продукти за да имат добра течливост е необходимо остатъчните липиди да са с по-високо съдържание на фосфатидилхолин.

3. Определяне на мастнокиселинния състав на фосфолипиди в липиди, изолирани от проби антибиотика Салиномицин с различна течливост

Данните за мастнокиселинния състав на изолираните индивидуални фосфолипидни класове от липидите на крайни продукти с различна течливост са представени в таблица 4.

Таблица 4. Мастнокиселинен състав на основни класове фосфолипиди, изолирани от крайни продукти Салиномицин с различна течливост

МК, %	с лоша течливост (<80%)		с добра течливост (80%)		много добра течливост (>80%)	
	ФХ	ФЕА	ФХ	ФЕА	ФХ	ФЕА
C 8:0	0,7 ±0,1	-	-	-	0,9 ±0,1	-
C 10:0	1,0 ±0,1	-	-	3,6 ±0,2	2,7 ±0,1	0,3 ±0,1
C 12:0	0,9 ±0,1	0,8 ±0,1	-	1,5 ±0,1	0,7 ±0,1	0,5 ±0,1
C 14:0	3,4 ±0,1	3,2 ±0,2	1,5 ±0,1	5,0 ±0,1	2,4 ±0,2	3,0 ±0,2
C 14:1	0,3 ±0,1	-	0,9 ±0,1	1,3 ±0,1	0,6 ±0,1	1,5 ±0,1
C 15:0	1,3 ±0,1	-	0,4 ±0,1	0,9 ±0,1	0,8 ±0,1	0,7 ±0,1
C 15:1	0,6 ±0,1	-	1,4 ±0,1	1,3 ±0,1	0,8 ±0,1	1,2 ±0,1
C 16:0	35,4 ±0,5	46,5 ±0,5	39,8 ±0,5	36,6 ±0,5	40,1 ±0,5	33,5 ±0,4
C 16:1	0,3 ±0,1	-	-	-	-	-
C 17:0	1,1 ±0,1	1,0 ±0,1	2,5 ±0,2	1,3 ±0,1	1,4 ±0,1	0,5 ±0,1
C 17:1	2,2 ±0,1	4,8 ±0,2	1,7 ±0,2	0,7 ±0,1	0,8 ±0,1	0,7 ±0,1
C 18:0	13,2 ±0,2	13,6 ±0,2	20,8 ±0,3	16,6 ±0,2	14,1 ±0,2	11,4 ±0,2
C 18:1	16,5 ±0,2	17,3 ±0,2	20,3 ±0,2	21,2 ±0,2	20,5 ±0,3	26,2 ±0,3
C 18:2	10,0 ±0,2	0,6 ±0,1	1,9 ±0,1	1,4 ±0,1	0,5 ±0,1	6,3 ±0,2
C 18:3	2,7 ±0,2	0,8 ±0,1	2,2 ±0,1	0,9 ±0,1	-	1,1 ±0,1
C 20:0	0,4 ±0,1	0,7 ±0,1	0,8 ±0,1	-	0,7 ±0,1	-
C 20:2	-	0,5 ±0,1	-	-	-	-
C 20:4	1,2 ±0,1	1,6 ±0,1	-	1,3 ±0,1	1,0 ±0,1	1,0 ±0,1
C 22:1	0,4 ±0,1	0,7 ±0,1	0,4 ±0,1	-	0,3 ±0,1	0,6 ±0,1
C 23:0	7,3 ±0,2	7,4 ±0,2	5,4 ±0,2	6,4 ±0,2	11,3 ±0,2	10,4 ±0,2
C 22:2	0,8 ±0,1	0,5 ±0,1	-	-	-	0,5 ±0,1
C 20:5	0,3 ±0,1	-	-	-	0,4 ±0,1	0,6 ±0,1

При изследване на мастнокиселинния състав на отделни класове фосфолипиди, изолирани от проби с различна течливост е установено, че те са с най-високо съдържание на палмитинова киселина ($C_{16:0}$) (33,5-46,5%), последвана от олеинова киселина ($C_{18:1}$) (16,5 - 26,2 %) и стеаринова киселина ($C_{18:0}$) (11,4-20,8 %). Наблюдават се различия в мастнокиселинния състав между отделните класове фосфолипиди на пробите с различна течливост. При пробите с добра и много добра течливост съдържанието на палмитинова киселина намалява в посока фосфатидилхолин > фосфатидилетаноламин (от 39,8 до 36,6% и 40,1 до 33,5%), което е за сметка на нарастване количеството на другия основен компонент олеиновата киселина (от съответно от 20,3 до 21,2% и от 20,5 до 26,2%). При пробата с лоша течливост е точно обратното - количеството на палмитиновата и олеиновата киселина е по-високо във фосфатидилетаноламина (съответно 46,5%и 16,5%) в сравнение с това на фосфатидилхолина (35,4% и 17,3%).

Количеството на стеаринова киселина варира в граници от 11,4 до 20,8%, като при пробата с лоша течливост количеството й във фосфатидилхолина и фосфатидилетаноламина е съизмеримо, а при останалите продукта количеството й намалява в реда фосфатидилхолин > фосфатидилетаноламин.

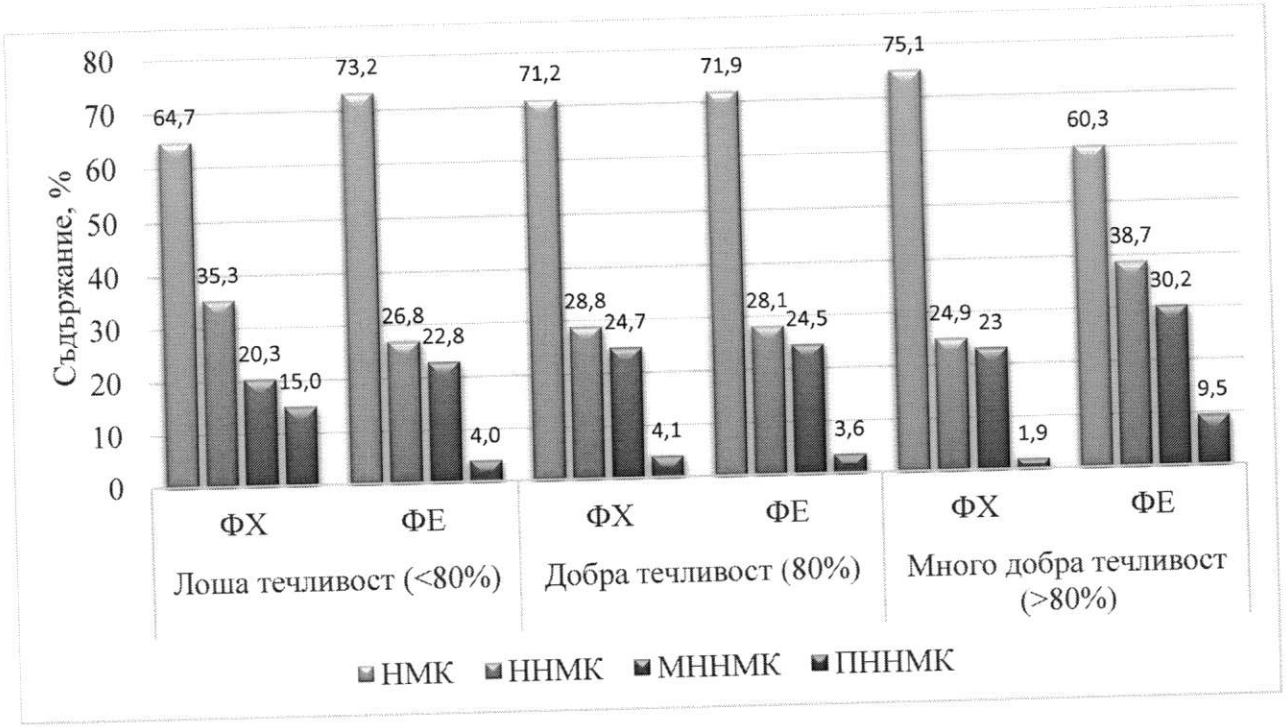
Количеството на линоловата киселина в отделните фосфолипидни класове и в трите изследвани проби е в границите от 0,5% до 10,0%, като е най-високо във фосфатидилхолина на пробата с лоша течливост и във фосфатидилетаноламина от пробата с много добра течливост.

Количеството на линоленовата киселина е в незначително, като намалява в посока фосфатидилхолин > фосфатидилетаноламин при пробите с лоша и добра течливост, докато при пробата с много добра течливост линолова киселина е установена само във фосфатидилетаноламина.

Установени са по-високи количества на миристинова (1,5 – 5,0%) и трикозановата киселина (5,4 – 11,3%) в сравнение с това на изходното рапично масло, използвано за хранителна среда при получаването на салиномицина. Количеството на миристиновата киселина нараства в посока фосфатидилетаноламин >фосфатидилхолин при пробите с добра течливост, докато не се установява определена зависимост в изменението на количеството на трикозановата киселина във фосфолипидните класове на трите изследвани проби.

Съдържанието на останалите наситени мастни киселини (каприлова, капринова, лауринова, пентадеканова, маргаринова и арахинова), както и на ненаситените (миристолеинова, пентадеценова, палмитолеинова, хептадеценова, гадолеинова, ерукова и $C_{20:4}$, $C_{20:5}$, и $C_{22:2}$) във фосфолипидната фракция са представени в незначителни количества.

На фиг. 1 са представени данните да съдържанието на наситени, ненаситени, моно- и полиненаситени мастни киселини на отделните класове фосфолипиди (фосфатидилхолин - ФХ и фосфатидилетаноламин - ФЕА), изолирани от продукти с различна течливост.



Фигура 1. Съотношение между наситени, ненаситени, моно- и полиненаситени мастни киселини на отделните класове фосфолипиди, изолирани от продукти с различна течливост.

От графиката се вижда, че преобладават наситените мастни киселини и при двата фосфолипидни компоненти (ФХ и ФЕА), като количеството им варира от 60,3% до 75,1%, а количеството на ненаситените киселини варира от 24,9% (>80%, ФХ) до 38,7% ((>80%, ФЕ). При пробата с лоша теливост (<80%) количеството на полиненаситени мастни киселини при фосфатидилхолина са 15,0% докато при пробата с добра течливост (80%) е 4,1%, докато при пробата с много добра течливост (>80%) е 1,9%. При пробите с добра и много добра течливост количеството на мононенаситените киселини варира от 23,0 до 30,2%, а на полиненаситените от 1,9% до 9,5%.

Данните за мастнокиселинния състав на изолираните индивидуални фосфолипидни класове от липидите на културална течност, взета в различни моменти от процеса на ферментация на салиномицина са представени в таблица 5.

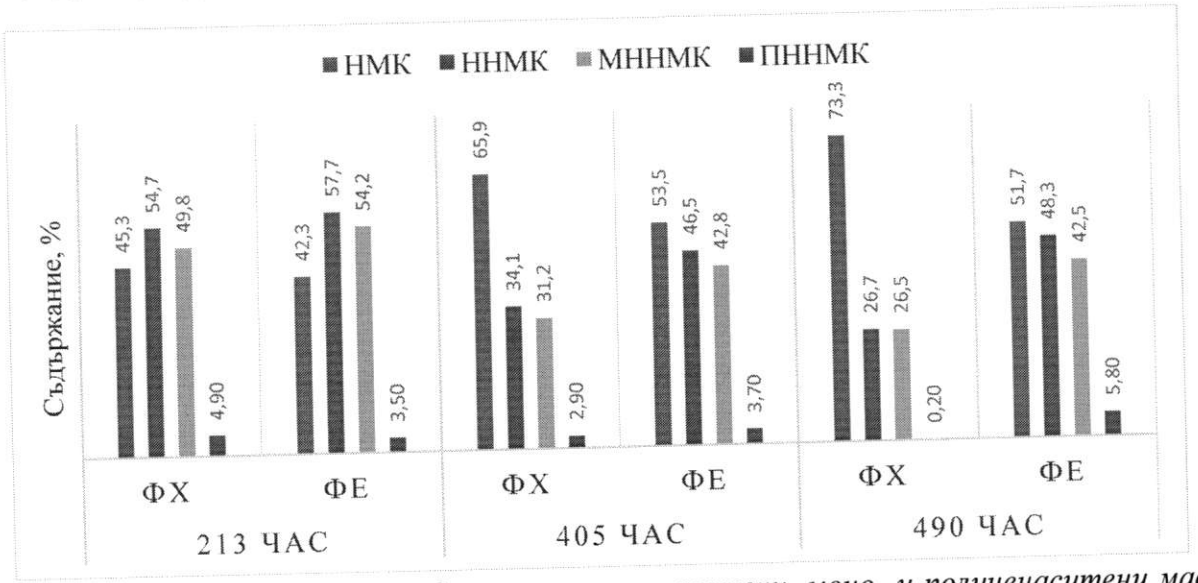
Таблица 5. Мастнокиселинен състав на фосфолипиди изолирани от културална течност по време на протичането на процеса на ферментация

МК, %	213ч.		405 ч.		в края на процеса (490 ч.)	
	ФХ	ФЕА	ФХ	ФЕА	ФХ	ФЕА
C 8:0	-	0,1 ±0,1	-	0,2 ±0,1	-	-
C 10:0	0,1 ±0,1	-	-	5,1 ±0,2	0,5 ±0,1	-
C 12:0	-	-	-	-	0,7 ±0,1	-
C 14:0	0,1 ±0,1	0,5 ±0,1	0,5 ±0,1	0,5 ±0,1	2,9 ±0,1	5,5 ±0,2
C 14:1	1,9 ±0,1	1,6 ±0,1	3,5 ±0,2	1,1 ±0,1	5,5 ±0,2	1,5 ±0,1

C 15:0	0,3 ±0,1	0,2 ±0,1	0,5 ±0,1	0,4 ±0,1	0,6 ±0,1	0,4 ±0,1
C 15:1	0,2 ±0,1	0,2 ±0,1	0,4 ±0,1	0,2 ±0,1	9,4 ±0,2	0,3 ±0,1
C 16:0	33,6 ±0,5	28,3 ±0,5	59,2 ±0,5	29,4 ±0,5	64,4 ±0,5	40,0 ±0,5
C 16:1	-	0,5 ±0,1	-	0,4 ±0,1	-	0,2 ±0,1
C 17:0	1,2 0,2	0,7 ±0,1	1,0 ±0,1	0,5 ±0,1	0,7 ±0,1	0,5 ±0,1
C 17:1	0,1 ±0,1	0,2 ±0,1	2,3 ±0,2	0,1 ±0,1	3,6 ±0,2	0,2 ±0,1
C 18:0	7,3 ±0,2	10,5 ±0,2	3,9 ±0,1	14,0 ±0,2	2,7 ±0,2	3,7 ±0,2
C 18:1	47,6 ±0,5	51,7 ±0,5	25,0 ±0,4	41,0 ±0,5	8,0 ±0,2	40,3 ±0,5
C 18:2	0,3 ±0,1	-	2,7 ±0,2	0,2 ±0,1	-	3,6 ±0,2
C 20:0	-	-	-	-	-	0,1
C 18:3	4,6 ±0,2	3,5 ±0,2	0,2 ±0,1	3,2 ±0,2	0,2 ±0,1	1,9 ±0,2
C 20:2	-	-	-	0,3 ±0,1	-	0,2 ±0,1
C 22:0	2,7 ±0,2	2,0 ±0,25	0,8 ±0,1	3,4 ±0,2	0,8 ±0,1	1,6 ±0,2

По време на ферментацията палмитиновата киселина ($C_{16:0}$) се повишава от 33,6 % (ФХ) -28,3 % (ФЕА) при 213 час до 64,4% (ФХ) – 40,0% (ФЕА) при 490 час. Наблюдава се намаляване на олеинова киселина ($C_{18:1}$) при фосфатидилхолина от 47.6% (213 час) до 8,0% (490 час), докато при фосфатидилетаноламина загубите на олеинова киселина ($C_{18:1}$) е значително по-малко от 51,7% (203 час) до 41,0% (405 час) и 40,3% в края на процеса. Линоловата киселина ($C_{18:2}$) е в ниски количества през целия производствен процес като границите са от 0 до 3,6%. Останалите мастни киселини са представени в минимални количества.

На фиг. 2 са представени данните да съдържанието на наситени, ненаситени, моно- и полиненаситени мастни киселини на отделните класове фосфолипиди, изолирани от продукт културална течност.



Фигура 2. Съотношение между наситени, ненаситени, моно- и полиненаситени мастни киселини на отделните класове фосфолипиди, изолирани от културална течност

По време на процеса на ферментация ненаситените мастни киселини намаляват за сметка на наситените мастни киселини. При фосфатидилхолина количеството на наситените мастни киселини при 213 час е 45,3% и достига 73,3% в края на процеса. При фосфатидилхолина количеството на ненаситените мастни киселини намаляват – от 54,7% (213 час) до 26,7% в края на ферментацията. В процеса на ферментация настъпват основно промени в количесвото на мононенаситените мастни киселини (от 49,8%- ФХ и 54,2% - ФЕА до 26,5% - ФХ и 42,5%- ФЕА), докато промените в количеството на полиненаситените мастни киселини в отделните фосфолипидни класове е незначително.

II. Публикации

- ✓ Втората публикация „Composition of lipids isolated from culture fluid in the production of salinomycin“, Bl. Chuchkov, G. Antova е изпратена в реферирано списание и е под рецензия.
- ✓ Третата публикация "Changes in the phospholipid composition of the cultural fluid during the production of the antibiotic salinomycin and in samples with different fluidity", Bl. Chuchkov, G. Antova е в процес на оформяне.

III. Работа върху оформяне на дисертацията

1. Допълване и оформяне на литературния обзор;
2. Оформяне на методичната част;
3. Систематизиране на резултатите и формулиране на общите изводи и приноси.

16.02.2022 г.
гр. Пловдив

Докторант:.....
/Благо Чучков/

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

Ръководител катедра:.....
/Доц. д-р М. Ангелова-Ромова/

МНЕНИЕ

от проф. д-р Гинка Атанасова Антова,
относно дейността на задочен докторант Благо Спасов Чучков,
към катедра Химична технология,
докторска програма "Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати"

През четвъртата година от подготовката си (1.02.2021 г. – 28.02.2022 г.) докторант Благо Чучков изпълни задачите, заложени в индивидуалния си план.

Докторантът продължи експерименталните изследвания по темата на дисертацията си, което включваше изследване състава на остатъчните липидни продукти изолирани от крайния продукт и от културална течност, взета от различни етапи на ферментацията на салиномицина. Основно изследванията бяха върху определяне на стероловия състав, индивидуалния фосфолипиден състав, както и на мастнокиселинния състав на основните фосфолипидни класове на изолираните остатъчни липиди от изследваните проби.

Заедно с експерименталната работа по дисертацията докторантът работи също така и върху оформянето й. Актуализиран е литературния обзор и се работи върху неговото оформяне и върху описанието на методичната част на дисертацията.

Подготвената статия със заглавие "*Changes of lipid composition from culture fluid during the production of antibiotic salinomycin*" е изпратена за публикуване и е в процес на рецензиране. Резултатите от направените изследвания се систематизират и в настоящия момент се подготвя и трета публикация „*Changes in the phospholipid composition of lipidsq isolated from the cultural fluid during the production of the antibiotic salinomycin and from samples with different fluidity*", която ще бъде също предложена за публикуване в реферирано и индексирано научно списание.

Моята препоръка към докторанта е да насочи усилията си към систематизиране на резултатите и цялостното оформление на дисертационния труд.

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

С оглед на постигнатите резултати считам, че Благо Спасов Чучков има готовност за финализиране на работата по дисертационния труд и предлагам на катедрения съвет да се обсъди предложението докторантът да бъде отчислен с право на защита.

Научен ръководител:.....
(проф. д-р Г. Антова)

23.02.2022 г.
гр. Пловдив

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

Д О К Л А Д

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

Господин Декан,

На заседание на Катедрения съвет на 23.02.2022 г. бе представен и разгледан обощен отчет на задочен докторант Благо Спасов Чучков за изпълнението на задачите по дисертационната му работа по докторска програма “Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати”.

Във връзка с приключване на срока на докторантурата и изпълнение на всички задачи по индивидуалния план, Катедреният съвет предлага на Факултетния съвет докторантът Благо Спасов Чучков да бъде отчислен с право на защита, считано от 1.03.2022 г.

Прилагам препис от протокола на катедрения съвет.

23.02.2022 г. Ръководител катедра ХТ:
(доц. д-р М. Ангелова-Ромова)

Пловдивски Университет "Паисий Хилендарски"
Катедра "Химична технология"

ПРОТОКОЛ № 145

от катедрено съвещание

Препис

Днес 23.02.2022 год. се състоя съвещание на кат. Химична технология.

Присъстваха: проф. д-р Г. Антова, доц. д-р М. Ангелова-Ромова, доц. д-р Г. Патронов, гл. ас. д-р Ж. Петкова, гл. ас. д-р О. Тенева, гл. ас. д-р И. Костова и гл.ас. д-р С. Манолов.

Съвещанието премина при следния дневен ред:

т.1. Учебни въпроси

Разглеждане отчета на докторанта Благо Спасов Чучков, задочен докторант към катедрата по докторска програма "Технология на животинските и растителни мазнини, сапуните, етеричните масла и парфюмерийно-козметичните препарати".

Докторанта Благо Чучков представи своят отчет за четвъртата година от докторантурата.

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

След обсъждане, членовете на катедрения съвет гласуваха оценка: Много добър и предлагат на Факултетния съвет да отчисли докторанта Благо Спасов Чучков с право на защита.

Протоколирал:

(хим. Ж. Симеонова)

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра „Аналитична химия и компютърна химия", проведено на 17.02.2022 г., беше разгледана молба от задочен докторант Нора Георгиева Сотирова за прекратяване на докторантурата ѝ по лични причини, считано от 21.02.2022 г.

Членовете на КС на КАХКХ единодушно подкрепиха с 12 гласа „за" молбата за прекратяване на обучението на докторанта.

Моля ФС на ХФ да утвърди прекратяването на докторантурата на Нора Георгиева Сотирова.

Прилагам:

1. Препис-извлечение от протокол на катедрения съвет;
2. Молба от докторант Нора Сотирова.

18.02.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание на КС

на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”

от 17.02.2022

ПРОТОКОЛ № 3

На 17.02.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Аналитична химия и компютърна химия”, проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 12

Присъстват : 12

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.1 беше разгледана молба от задочен докторант Нора Георгиева Сотирова за прекратяване на докторантурата ѝ по лични причини, считано от 21.02.2022 г.

Предложението беше гласувано и прието с 12 гласа „за“.

21.02.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

ДО РЕКТОРА

НА ПЛОВДИВСКИЯ УНИВЕРСИТЕТ

„ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ“

МОЛБА

От Нора Георгиева Сотирова

Адрес: гр. Пловдив, ул. Иларион Макариополски №33

Тел: 0887 453 452

ГОСПОДИН РЕКТОР,

Моля за Вашето разрешение да прекратя докторантурата по:

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

Професионално направление: 4.2. Химически науки

Докторска програма: Аналитична химия

към катедра: Аналитична химия и компютърна химия, на Химически факултет

дата на записване в докторантура: 01.03.2017г

заповед № Р33-672 от 16.02.2017г

тема на дисертационната работа: Методи за определяне на следови елементи в тежки матрици от металургичните производства

утвърдена от Факултетен съвет в заседание от 31.01.2017

протокол № 186

научен ръководител: доц. др. В. Стефанова

Поради лични причини, моля прекратяването да влезе в сила от 21.02.2022г.

Дата 17.02.2022

Гр. Пловдив

С уважение: Н. Сотирова

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 26.01.2022 г. в катедра „Аналитична химия и компютърна химия" беше проведен избор за заемане на административната длъжност „ръководител катедра", поради изтичане на предходния 4-годишен мандат (считано от 25.01.2018). Единствен кандидат за длъжността беше доц. Кирил Симитчиев – досегашен ръководител на КАХКХ.

Катедрата се състои от 12 преподаватели, а на заседанието на КС на КАХКХ присъстваха 10 от членовете на катедрата с право на глас. Проф. Пламен Пенчев отсъства, поради декларирано от негова страна здравословно неразположение, а ас. Ася Христозова е в задгранична командировка във Виена, Австрия.

За провеждане на избора с таен вот, бе избрана чрез явно гласуване комисия в състав: председател – гл. ас. д-р Веселина Паскалева и членове ас. Лидия Кайнарова и химик Петя Балабанова. За изразяване на вота в използваните бюлетини беше приложен принципа: „желаното се зачертава".

Резултатите от проведеното гласуване бяха обявени от председателя на комисията по избора както следва:

- „ЗА" – 10 бюлетини; „ПРОТИВ" – няма; „ВЪЗДЪРЖАЛ СЕ" – няма; недействителни бюлетини – няма.

За положителен избор са необходими 6 гласа „ЗА" от 11-членния списъчен състав на катедрата (ас. Ася Христозова се редуцира поради задгранична командировка), поради което избора на доц. Кирил Симитчиев за ръководител катедра „Аналитична химия и компютърна химия" с 10 положителни вота може да се счита за легитимен.

Моля, Факултетният съвет на Химическия факултет да утвърди избора на доцент д-р Кирил Симитчиев за ръководител на катедра „Аналитична химия и компютърна химия".

Прилагам препис извлечение от протокол на КС и бюлетините от проведения таен избор.

27.01.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

доц. д-р Кирил Симитчиев

Препис-извлечение от заседание
на катедрения съвет на катедра
"Аналитична химия и компютърна химия"
от 26.01.2022

ПРОТОКОЛ № 2

На 26.01.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия".

Общ състав: 12

Присъстват :

1. доц. д-р Кирил Симитчиев
2. доц. д-р Веселин Кметов
3. доц. д-р Николай Кочев
4. гл.ас. д-р Атанас Терзийски
5. гл.ас. д-р Деяна Георгиева
6. гл.ас. д-р Веселина Паскалева
7. гл.ас. д-р Евелина Върбанова
8. гл.ас. д-р Слава Цонева
9. ас. Лидия Кайнарова
10. ас. Димитър Стоицов

Отсъстват:

- ас. Ася Христозова – командировка във Виена, Австрия
- проф.дн Пламен Пенчев - поради декларирано от негова страна здравословно неразположение

Необходим брой за положителен избор: 6 (ас. Ася Христозова се редуцира поради задгранична командировка)

Дневен ред:

1. Избор на ръководител на катедрата
2. Учебни въпроси
3. Текущи въпроси

Точка 1. В катедра „Аналитична химия и компютърна химия" беше проведен избор за заемане на административната длъжност „ръководител катедра", поради изтичане на предходния четиригодишен мандат (считано от 25.01.2018). Единствен кандидат за длъжността беше доц. Кирил Симитчиев– досегашен ръководител на КАХКХ.

За провеждане на избора с таен вот, бе избрана чрез явно гласуване комисия в състав: председател – гл. ас. д-р Веселина Паскалева и членове ас. Лидия

Кайнарова и химик Петя Балабанова. За изразяване на вота в използваните бюлетини беше приложен принципа: „желаното се зачертава“.

Резултатите от проведеното гласуване бяха обявени от председателя на комисията по избора както следва:

- „ЗА“ – 10 бюлетини; „ПРОТИВ“ – няма; „ВЪЗДЪРЖАЛ СЕ“ – няма; недействителни бюлетини – няма.

Изборът на доц. Кирил Симитчиев за ръководител катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ с 10 положителни вота може да се счита за легитимен.

Решение: Катедреният съвет на КАХКХ с тайно гласуване избра за ръководител на катедрата доц. д-р Кирил Костов Симитчиев и предлага на Факултетния съвет на Химическия факултет той да бъде утвърден.

26.01.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

Ръководител на КАХКХ:

/доц. д-р К. Симитчиев/

До Декана на ХФ

при ПУ "Паисий Хилендарски"

Тук

Д О К Л А Д

от доц. д-р Кирил Симитчиев

Ръководител на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"

Уважаеми г-н Декан,

На заседание на Катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка на 17.02.2022 г., беше обсъдено осигуряването на учебните занятия за втори семестър, редовно обучение на академичната 2021-2022. Във връзка с това бе предложено да се привлече като хоноруван преподавател магистър Мария Иванова Качарова за провеждане на 150 ч. практически занятия по дисциплините „***Аналитична химия с ИМА***" (за специалности Медицинска Биология, Молекулярна Биология и Биоинженерство) и „***Аналитична химия"*** (за специалност Обучение по природни науки в ПГ на УО).

Катедреният съвет единодушно прие (12 гласа „за") и предлага на Факултетния съвет да одобри Мария Качарова като хоноруван преподавател.

Прилагам препис-извлечение от КС на КАХКХ.

18.02.2022 г.

Ръководител КАХКХ:

/доц. д-р Кирил Симитчиев/

Препис-извлечение от заседание на КС
на катедра "Аналитична химия и компютърна химия"
от 17.02.2022

ПРОТОКОЛ № 3

На 17.02.2022 г. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра "Аналитична химия и компютърна химия", проведено под формата на интернет-базирана конферентна връзка.

Общ състав: 12

Присъстват : 12

Дневен ред:

1. Учебни въпроси
2. Текущи въпроси

По точка 1.2 беше обсъдено осигуряването на учебните занятия за втори семестър, редовно обучение на академичната 2021-2022. Във връзка с това бе предложено да се привлече като хоноруван преподавател магистър Мария Иванова Качарова за провеждане на 150 ч. практически занятия по дисциплините „***Аналитична химия с ИМА***" (за специалности Медицинска Биология, Молекулярна Биология и Биоинженерство) и „***Аналитична химия***" (за специалност Обучение по природни науки в ПГ на УО).

Предложението беше гласувано и прието с 12 гласа „за".

21.02.2022 Протоколирал:

/П. Балабанова/

Химически Факултет
ул. "Цар Асен " № 24, гр. Пловдив – 4000
Тел.: 359 32 / 261 402
Факс: 359 32 / 261 403
chemistry@uni-plovdiv.net
argon.uni-plovdiv.bg

Катедра О Р Г А Н И Ч Н А Х И М И Я

ДО
ДОЦ. Д-Р ВЕСЕЛИН КМЕТОВ
ДЕКАН
НА ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ
ПУ "ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"
ПЛОВДИВ

Д О К Л А Д

от проф. д-р Илиян Иванов

ръководител катедра Органична химия

УВАЖАЕМИ ДОЦ. КМЕТОВ,

Моля да внесете във факултетния съвет на Химически факултет, предложение за хонорувани преподаватели към катедра Органична химия за втори семестър на учебната 2021-2022 г. както следва:

1. ас. Десислава Минкова Киркова (ИТТИ) – 150 часа упражнения по дисциплината „Химия на козметичните продукти"

2. Иван Георгиев Тимонов - 45 часа упражнения по Биоорганична химия със специалности: „Анализ и контрол", „Химия с маркетинг", „Компютърна химия"

3. д-р Красимир Пламенов Витларов - 90 часа (2 групи х 45 часа) упражнения по Органична химия със специалност "Биология и химия".

Приложено, препис-извлечение от протокол от заседание на КС на кат. Органична химия.

С уважение,

.....
ПРОФ. Д-Р ИЛИЯН ИВАНОВ
Ръководител катедра Органична химия

ПРЕПИС-ИЗВЛЕЧЕНИЕ
от протокол **№ 341/25.02.2022 год.**
заседание на КС
на катедра“Органична химия”
ПУ „П. Хилендарски”

Протокол № 341

На 25.02.2022 год. се проведе заседание на катедрения съвет на катедра “Органична химия” в синхронна дистанционна форма с линк: https://meet.jit.si/KCOX

Общ състав на катедрен съвет - 8. Присъстват 8: проф. д-р Илиян Иванов, доц. д-р Румяна Бакалска, доц. д-р Стела Статкова-Абегхе, доц. д-р Пламен Ангелов, доц. д-р Стоянка Атанасова, гл. ас. д-р Димитър Божилов, гл. ас. д-р Йордан Стремски и гл. ас. д-р Мина Тодорова. Отсъстващи: няма.

Присъстващи извън състава на кат. Органична химия: гл. ас. д-р Станимир Манолов.

Необходим брой за положителен избор 5.

Дневен ред:

1. Учебни.
2. Текущи.

По т.1 от дневния, ръководителят на кат. ОХ - проф. д-р Илиян Иванов внесе предложение за хонорувани преподаватели към катедра Органична химия за втори семестър на учебната 2021-2022 г. както следва:

1. ас. Десислава Минкова Киркова (ИТТИ) – 150 часа упражнения по дисциплината „Химия на козметичните продукти“
2. Иван Георгиев Тимонов - 45 часа упражнения по Биоорганична химия със специалности: „Анализ и контрол“, „Химия с маркетинг“, „Компютърна химия“
3. д-р Красимир Пламенов Витларов - 90 часа (2 групи х 45 часа) упражнения по Органична химия със специалност "Биология и химия"

Направеното предложение бе подложено на гласуване.

Гласували: 8; За: 8; Против: 0; Въздържали се: 0;

След обсъждане, катедреният съвет единодушно прие предложенията за хонорувани преподаватели към катедра Органична химия за втори семестър.

Решение: КС предлага на ФС:

Да одобри предложенията на КС за хонорувани преподаватели към катедра Органична химия за втори семестър на учебната 2021-2022 г.

25.02.2022 год.
гр. Пловдив

Протоколчик:
(гл. ас. д-р Й. Стремски)