**ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ**



**”ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”**

България 4000 гр. Пловдив ул. “Цар Асен” № 24; Централа: (032) 261 261

Декан: (032) 261 402 факс (032) 261 403 e-mail: chemistry@uni-plovdiv.bg

**У Ч Е Б Н А П Р О Г Р А М А**

**Факултет / филиал**

**ХИМИЧЕСКИ**

**Катедра**

**Аналитична химия и компютърна химия**

**Професионално направление (на курса)**

**4.2 Химически науки**

**Специалност**

**Хранителна химия** (задочно обучение, неспециалисти)

**ОПИСАНИЕ**

**Наименование на курса**

***Комбинирани хроматографски техники***

**Код на курса**

**Тип на курса**

Избираема

**Равнище на курса (ОКС)**

Магистър

**Година на обучение**

ВТОРА

**Семестър/ Триместър**

ІII

**Брой ECTS кредити**

**4**

**Име на лектора**

Доц. д-р Веселин Кметов

**Учебни резултати за курса**

**Анотация**

Целта на курса по ***Комбинирани хроматографски техники*** е да задълбочи и разшири познанията на студентите относно възможностите и приложенията на инструментите за Газовата (GC) хроматография и Високоефективната течна хроматография (HPLC) в комбинация с различни детекторни системи, с акцент върху селективните масспектрални анализатори (MS) и тандемни такива – MS/MS. Представят се най-новите апарати на водещи производители Agilent, Thermo, Perkin-Elmer, Waters, SCIEX, Shimadzu и др. като студентите придобиват умения за критично оценяване на предимствата и ограниченията на съответните технически решения, както и избор на подходящ за конкретни приложения инструментален метод. На студентите се предоставят обучителни програми, симулационни програми, демонстрационни бази данни, както и интернет базирани ресурси с обучителни материали и разработени аналитични приложения чрез комбинирани хроматографски методи.

**Компетенции**

Успешно завършилите обучението по тази дисциплина:

* **ЩЕ ЗНАЯТ:**
* Основните принципи при оптимизиране на хроматографското изпълнение.
* От къде да черпят информация относно съвременните технически решения в хроматографския анализ и как критично да я оценяват;
* Особеностите на комбинациите хроматографско разделяне и детекция;
* Как се интерпретира масспектър – номинална маса и точна маса, псевдо-молекулен йон, прекурсор и продуктови йони.
* Как да изберат подходящ метод за анализ на конкретен обект;
* **ЩЕ МОГАТ:**
* Провеждат хроматографски анализ чрез HPLC система и да оптимизират режимите на инструменталното изпълнение.
* Да намират потвърдителни данни за идентификация на определяемите аналити;
* Да охарактеризират количествени определения, като изчисляват и представят резултати от аналитични изпитвания с хроматографски техники.

**Начин на преподаване**

|  |  |
| --- | --- |
| **Аудиторно: 40 ч.**   * Лекции (20 часа), * Лабораторни упражнения (20 часа) | **Извънаудиторно: 80 ч**   * Самостоятелна подготовка * Консултации |

**Предварителни изисквания (знания и умения от предходното обучение)**

Задължително изискване е студентите да са изучавали курсовете по: ***Математика, Основи на химията; Органична химия, Аналитична химия, Инструментални методи за анализ.***

Студентите трябва да имат задълбочени познания по органична химия, аналитична химия и инструментални методи за анализ, както и да притежават основни умения за работа в химична лаборатория.

**Съдържание на курса**

Курсът по ***Комбинирани хроматографски техники*** надгражда знанията от ОКС Бакалавър, като дава специализирана подготовка за това как теоретичните основи на хроматографията се отразяват в технологичните решения на комбинациите на методите за разделяне с методите за детекция. Акцент е поставен върху модерните интерфейси и масселективни детектори към GC и HPLC.

Практическите занятия включват симулационни задачи, при които студентите работят индивидуално и експериментална групова задача, която студентите разработват в група от до 4-ма обучаеми. Занятията се провеждат в блокове по 5 часа и по 10 часа.

***Тематично съдържание на учебната дисциплина***

**А/ Лекции**

|  |  |
| --- | --- |
| Тема | часове |
| **І. Основни теоретични постановки при оптимизиране на хроматографски анализи**– Оптимизация на разделителна способност, използване на параметрите на уравнението на Ван Демптер за повишаване на ефективността на хроматографското разделяне. | 5 |
| **II Съвремени инструментални решения за комбинирани хроматографски методи**. Масселективни анализатори – квадруполен, време на прелитане, йон уловителни и орбитрап системи. Тандемни масспеткрометри - QQQ; Q-TOF; QExactive системи на различни производители на пазара.  Представяне на най-новите инструменти на пазара. Гост лектори от водещи фирми производители. | 5  +  5 |
| **III. Data mining – извличане на качествена и количественна информация от хроматограми с масспектрални данни** – SIM и SRM режими на регистрация на йоните сигнали, Мултиплексинг подходи при тандемни масспектрометри. | 5 |
| **Общ брой часове** | **20** |

**Б/ Упражнения**

|  |  |
| --- | --- |
| **I. Занятие**   * Самостоятелна работа оптимизация на хроматографско определяне на 5 компонента чрез HPLC – симулационен софтуер - <http://www.hplcsimulator.org/simulator.php> и Android application HPLC simulator | 5 |
| ***II*. Занятие**   * Работа с бази данни за масспектри на NISTMS/MSSEARCH free demo version. и работа с LC-MS fundamentals на Agilent | 5 |
| **III. Занятие**   * Практическа задача - количествен анализ на eтилентиоурея (ETU) в Манкозеб произведен от АГРИЯ АД, чрез HPLC с UV/VS DAD | 10 |
| **Общ брой часове** | **20** |

**В/ Самостоятелна подготовка**

На студентите се предоставят учебни материали, обучителни програми и презентационни материали за самостоятелно разглеждане. Обучаемите се регистрират в платформата на SCIEX Univesrsity и могат да ползват обучителните ресурси, разработени и разрешени за свободен достъп от там.

**Техническо осигуряване на обучението**

* Компютри с интернет достъп от компютърните зали. (Студентите могат да ползват собствените си смартфони, като им се инсталират демо приложения)
* Лаборатории, снабдени с оборудване и реактиви за провеждане на хроматографски анализ, поточна система за дейонизирана вода; нагревателни уреди и водни бани; центрофуги; ултразвукова вана; чисти разтворители за хроматографски анализ
* Тегловна лаборатория: 4 бр. аналитични везни (с точност до 10-4g) и 1 техн. везна.
* Индивидуални комплекти лабораторна стъклария
* Течен хроматограф HPLC НР1090, с DAD детектор и Chemstation софтуер.

**Библиография**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| ***Автор*** | ***Заглавие*** | ***Издателство*** | ***Година*** |
| **В. Кметов** | **Свитък лекционен курс - MS PowerPoint - разпечатка и електронна версия** | | 2021 |
| R. Kellner et al., | Analytical Chemistry: A Modern Approach to Analytical Science, 2nd ed | John Wiley & Sons | 2004 |
| Р. Борисова | Основи на химичния анализ | Водолей | 2009 |
| IUPAC Recommendations 2017 | Terminology of separation methods | Pure Appl. Chem. 90(1) | 2018 |
| SCIEX | Your CE, LC-MS and LC-MS/MS Education Portal | | https://sciex.com/education |  |

**Планирани учебни дейности и методи на преподаване**

Занятията са съпроводени с мултимедийна презентация, като студентите се стимулират да участват активно в дискусии и да отговарят на поставени въпроси.

По време на лекциите се канят за презентации и експерти от бизнеса – инструменталисти с доказан опит или представители на водещи фирми, предлагащи съвременни инструменти по комбинирани хроматографски техники.

Предвидени са интерактивни упражнения със симулатори и обучителни програми..

**Методи и критерии на оценяване**

Студентите се стимулират за активна работа по време на занятията, като получават „бонуси“ по 0.1 точка за всяка активност. Сумата от бонусите се прибавя към оценката от изпита след приключване на курса. Изпитът е комбинация от активен и пасивен тест и изчислителни задачи, включващ всички теми от учебната програма.

Студентите имат право да ползват записки и учебни материали, без достъп до интернет.

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 Веселин Кметов ......................