



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ

“ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ”

ХИМИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ

ПРОГРАМА

ЗА ДЪРЖАВЕН ИЗПИТ

Професионално направление: **Химически науки**
Образователно-квалификационна степен: **Магистър**
СПЕЦИАЛНОСТ: **Спектрохимичен анализ**

1. Системи за въвеждане на проби в атомната спектроскопия. Въвеждане на течни проби – пулверизация, видове пулверизатори. Въвеждане на газови проби – хидридно генериране. Системи за въвеждане на твърди проби – директно внасяне в източника (DI); искрово изпаряване (SS); лазерно изпаряване (LA).
2. Системи за инжекционно въвеждане на течни проби. Инжектиране в непрекъснат поток носител (Flow Injection – FI). Инжектиране в прекъснат поток (ASDI).
3. Източници на спектрално активна форма в атомната спектрометрия (генератори на сигнал). Пламъци и графитови пещи. Статични електрически разряди. Качества и характеристики на динамични плазмени разряди: правотокова капацитивна плазма (DCP); микровълнови плазми (CMP, MIP); индуктивно-свързана плазма. Предимства и недостатъци на системи за аксиално и радиално наблюдение в индуктивно свързана плазма. Оптични системи в АС – монохроматори, полихроматори, Echelle оптика. Детекторни системи.
4. Развитие на елементната мас-спектрометрия. Йонизационни източници. Интерфейс и йонна оптика. Видове мас-филтри – квадруполен, магнитен и мас-филтри с висока разделителна способност (HRSF). Системи за редуциране на спектрални пречения - студена плазма, колизионни и динамични реакционни клетки. Детекторни системи.
5. Основни принципи, предимства и недостатъци на масспектрометрията с индуктивно свързана плазма (ICP-MS) и мас-спектрометрия по време на прелитане (ICP –TOFMS). Изотопен анализ и оценка на изотопно отношение.
6. Методи за представяне на химични структури. Таблица на свързаност. Линейни нотации. 2D представяне. 3D представяне. Топологични дескриптори и матрици.
7. Метод на молекулната механика. Силово поле и потенциални функции. Повърхнина на Борн-Опенхаймер. Конформери и конформации. Методи за минимизация на енергията. Конформационен анализ.
8. Обработка на химични сигнали. Фурие трансформация на сигнал. Региони на представяне. Конволюция и деконволюция. Филтриране на сигнали. Изглаждане на сигнали. Методи за структурно представяне.
9. Основи на вибрационната спектроскопия. Трепене на двуатомна молекула в хармонично и анхармонично приближение. Трепене на многоатомни молекули: брой и видове трепения. Форми на трепенията.
10. Инфрачервена спектроскопия. Интензитет на ивиците в ИЧ спектри. Фактори, които влияят върху интензитета на ивиците в ИЧ спектри.
11. Фактори, които влияят върху положението на ивиците в ИЧ спектри. Изотопен ефект. Вибрационно взаимодействие. Електронни ефекти. Хибридизация и циклично напрежение.
12. Търсене в библиотеки от ИЧ спектри. Структура на спектралната библиотека. Методи за търсене по спектрални криви и методи за търсене по пикови таблици.
13. Многокомпонентен анализ в УВ-Вид спектроскопия. Линейна многопроменлива регресия. Изчисляване на матрицата на чувствителностите и на матрицата на концентрациите.
14. Комбинирани хроматографски техники. Възможности и ограничения на хроматографски системи в комбинация с различни масанализатори – единичен и троен квадрупол, Q-TOF, Orbitrap. Разделителна способност по маси.

15. Организиране на дейността на изпитвателна лаборатория съгласно изискванията на БДС EN ISO/IEC 17025:2018. Система за управление на качеството. Акредитиране на изпитвателна лаборатория.
16. Осигуряване на метрологична проследимост при химичните измервания. Организация на йерархията на съподчиненост на еталоните към SI система. Начини за доказване на проследимостта на резултата в лабораторията. Работа със сертифицирани сравнителни материали.
17. Бюджет на неопределеността на резултатите от химични измервания. Видове неопределеност, начини за количествено оценяване и представяне. Диаграма – „рибена кост“. Конструирание на моделно уравнение. Оценка на влияещите величини - подобряване на качеството на резултата по отношение на представената разширена неопределеност.
18. Валидиране на аналитична процедура в изпитвателната лаборатория. Подбор на аналитични характеристики на процедурата, подлежащи на оценка за доказване на твърдението „годен за целта“. Методика за пълно и частично валидиране и верифициране. Участие в междулабораторни сравнения и тестове за компетентност - оценка на изпълнението.

Литература

1. Р. Борисова, Основи на химичния анализ, 2009, Водолей, София
2. Н. Даскалова, С. Величков, П. Петров, Атомна емисионна спектрометрия с индуктивно свързана плазма, УИ „Неофит Рилски“, Благоевград, 2016
3. И. Хавезов, Д. Цалев, Безпламъкови методи на атомно-абсорбционния анализ, УИ „Св. Климент Охридски“, С., 1991
4. И. Хавезов, Д. Цалев, Атомно-абсорбционен анализ, Наука и изкуство, С., 1980
5. P.W.J.M Boumans, Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy, 1987 Wiley
6. A. Montaser, Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry, 1998 Wiley
7. J. A. C. Broekaert, Analytical Atomic Spectrometry with Flames and Plasmas, 2002, Wiley
8. D. Harvey, Modern analytical chemistry, McGraw-Hill, 2000
9. J. S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry Principles and Applications, 2007 Wiley
10. Г. Андреев. Молекулна спектроскопия, Изд. ПУ “П. Хилендарски”, Пловдив, 2010 (<http://web.uni-plovdiv.bg/andreev/andreev-ms-2010.pdf>)
11. П. Пенчев; Молекулна механика. Потенциално поле ММХ, Списание "Коснос" (www.kosnos.net), брой 5, 2007 г.
12. П. Пенчев; Хемометрика (поредица в списание "Коснос", www.kosnos.net), <http://kosnos.net/resources/chemos.html>
13. Г. Крисчън, Д. О'Рейли, Инструментален Анализ, 1998, Издателство на Софийски университет, София
14. Ed. T. Engel, J. Gasteiger, Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods, Wiley-VCH, 2018
15. В. Симеонов, Принципи на обработка на химичните данни, 2000, Издателство на Софийски университет, София
16. D. Massart, B. Vandeginste, S. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman, Chemometrics, Volume 2: A Textbook (Data Handling in Science and Technology), 2003, Elsevier
17. БДС СД Ръководство 99 на ISO/IEC: 2014, Международен речник по метрология, Основни и общи понятия и свързани термини (VIM)
18. БДС EN ISO/IEC 17025:2018 Общи изисквания за компетентността на лаборатории за изпитване и калибриране
19. EURACHEM/CITAC, Traceability in Chemical Measurement – a Guide to Achieving Comparable Results in Chemical Measurement, 2003
20. EURACHEM/CITAC, Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement (Guide CG 4), 2012
21. EURACHEM, The Fitness for Purpose of Analytical Methods - a Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, 2014