

Специализирани курсове  
в ИОНХ – БАН  
Направление „Нанонауки, нови материали и технологии“  
към Центъра за Обучение на БАН  
[http://edu.bas.bg/doctorant\\_school/spec\\_courses/3\\_nano/nano.html](http://edu.bas.bg/doctorant_school/spec_courses/3_nano/nano.html)

### 3.6. - ИНСТИТУТ ПО ОБЩА И НЕОРГАНИЧНА ХИМИЯ

София 1113, ул. "Акад. Г. Бончев" бл. 11

#### Тема 3.6.1. НЕОРГАНИЧНА КРИСТАЛОХИМИЯ И РЕНТГЕНОСТРУКТУРЕН АНАЛИЗ INORGANIC CRYSTAL CHEMISTRY AND X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS

This course may also be held in English, upon request.

Лектор:

Даниела Ковачева, проф. д-р

Daniela Kovacheva, Prof. Dr.

Тел. 979 2587

E-mail: [didka@svr.igic.bas.bg](mailto:didka@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Обособяването на химията на твърдото тяло като самостоятелна научна дисциплина и теоретична основа на съвременното материалознание, е факт много добре осъзнат и възприет в международната научна среда. То е следствие от бурното развитие на модерните твърдотелни технологии използващи нетрадиционни материали в електрониката, машиностроенето, енергетиката, информатиката, средствата за комуникации, медицината, космическите и военни технологии, опазването на околната среда и пр. Понастоящем, по оценка на проф. М. Стенли Уитингам от State University of New York, всеки трети химик се занимава с проблеми свързани с материята, в нейното кристално състояние. За химиците-неорганици този дял е много по-висок. На този фон

университетската подготовка на българските химици в областта на кристалохимията е крайно незадоволителна. Наистина, в различни спецкурсове различни студенти получават знания за елементите на кристалографията, физиката на твърдото тяло, кристалохимията, но при отсъствие на единен общ курс, вероятността да се намери човек, подготвен за работа в тази област е почти нулева. Нещо повече, преобладаващата част от българските химици-неорганици, научени да възприемат материята на молекулярно, а не на кристално ниво, по силата на обстоятелствата са принудени да работят именно кристалохимия. Въвеждането на модерните технологии в химичните и електронни производства у нас и в света е доказало убедително нуждата от специалисти, които умеят да мислят с понятията на връзка структура-свойства. Такъв тип подготовка им дава миросглед, който позволява намиране на оригинални решения чрез логично обобщаване на знанията и опита на тесните специалисти и технолози. Такъв тип специалисти са нужни практически във всички приоритетни за света направления в науката, свързани с високотехнологичните производства на твърдофазни материали.

#### Annotation:

The establishment of solid state chemistry as an individual science and theoretical basis of modern materials science is a fact well acknowledged and accepted by the international scientific community. It is a consequence of the rapid development of modern solid-state technology using non-conventional materials in electronics mechanical engineering, energetics, informatics, communication, medicine, aerospace and military technologies, environmental protection, etc. Currently, according to the assessment of Professor Stanley M. Whittingham of the State University of New York at Binghamton, every third chemist deals with problems related to the matter in its crystalline state. For inorganic chemists this percentage is even much higher. At this background, the academic education of Bulgarian chemists in the field of crystal chemistry is utterly unsatisfactory. Indeed, in different specialized courses, students gain knowledge about the elements of crystallography, solid state physics, crystal chemistry, but in the absence of an integrated course, the probability to find a student prepared to work in this area is almost nil. Moreover, although the majority of Bulgarian inorganic chemists have learned to perceive matter on a molecular rather than crystal level, under the circumstances, they are forced to rely on crystal chemistry. The introduction of modern technologies in chemical and electronic industries

in the country and in the world has conclusively demonstrated the need for professionals who can think in terms of the structure-properties relationship. This type of training gives them a wide overview that allows them finding innovative solutions through logical generalization of narrow specialized knowledge, experience and technology. Such types of specialists are needed in virtually all priority areas in science-related high-tech solid material industries on a world scale. The evaluation shows that training of specialists and PhD students in crystal chemistry and X-Ray diffraction analysis will give the young chemists a necessary background for understanding the crystal structure and its relationship to materials properties. The level of training of professionals in this area in the Institute of General and Inorganic Chemistry can fill the emptiness in university education of chemists in this field.

### Тема 3.6.2. АТОМНОАБСОРБЦИОНЕН АНАЛИЗ

#### ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRIC ANALYSIS

This course may also be held in English, upon request.

Лектор:

Албена Дечева, проф. д-р

Albena Detcheva, Prof. Dr.

Тел. 979 2504

E-mail: [albena@svr.igic.bas.bg](mailto:albena@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 20 учебни часа

Анотация:

Атомноабсорбционният анализ е аналитичен метод, който все по-често се прилага поради високата чувствителност, с която се определят над 70 елемента от Менделеевата таблица, високата му селективност и достъпния инструментариум. В курса по Атомноабсорбционен анализ са разгледани теоретичните основи на аналитичната химия, на инструменталните методи за химически анализ, принципът на действие и характеристиките на атомноабсорбционните спектрометри с пламъкови и безпламъкови

атомизатори, пречещите влияния, както и начините за тяхното отстраняване или намаляване. Специално внимание е отделено на директните електротермични методи за анализ на твърди проби. Курсът е предназначен както за докторанти (химици и физици), така и за специалисти, които използват атомноабсорбционните методи за анализ (следдипломна квалификация).

**Annotation:**

Atomic absorption analysis is an analytical method, widely used thanks to its high sensitivity for the determination of more than 70 elements of the Periodic Table; high selectivity and low capital costs. The course Atomic absorption analysis includes lectures concerning the theoretical bases of analytical spectrometry and the instrumental methods for chemical analysis; the operating principles and characteristics of atomic absorption spectrometers with both flame- and flameless atomizers; the interferences and the methods for their elimination or minimization. Special attention is paid to the electrothermal atomic absorption spectrometry for direct analysis of solid samples. The course is intended for PhD-students (chemists and physicists) as well as for specialists who use atomic absorption methods for analysis (post-graduate qualification).

**Тема 3.6.3. ИЗЧИСЛИТЕЛНИ МЕТОДИ В НЕОРГАНИЧНОТО МАТЕРИАЛОЗНАНИЕ  
COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE**

This course may also be held in English, upon request.

**Лектор:**

Ивелина Георгиева, проф. д-р

Ivelina Georgieva, Prof. Dr.

Тел. (+359 2)9792592

E-mail: [ivelina@svr.igic.bas.bg](mailto:ivelina@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

**Анотация:**

Целта на курса е да представи съвременните теоретични и изчислителни методи и техните специфични приложения за изследване на неорганични системи и материали както и за прогнозиране на техните свойства от първи принципи. Компютърните симулации на атомно ниво са мощен подход, позволяващ достъп до микроскопските процеси при неорганичните системи, който може да допринесе много за разбиране на химичните структури, физикохимичните им свойства и реактивоспособност. Методите основани на първи принципи разглеждат електроните в модела изрично (квантово-механично) и могат точно да опишат електронната структура и химичната връзка в неорганичните съединения. Ползата от компютърното моделиране е, че то съществено съкращава времето за изследване, обяснява и предсказва структури и свойства, недостъпни за определяне по експериментален път и насочва дизайна на материали с нови или усъвършенствани свойства. Ето защо, прилагането на съвременни изчислителни методи за компютърно моделиране на неорганични системи при изследване и прогнозиране на техните свойства е актуално за изследванията в областта на новите материали. Програмата на курса предвижда да представи теорията на съвременните изчислителни методи и да илюстрира тяхното приложение за: (1) изследване на молекулни, кълъстерни и периодични системи; (2) симулиране на спектроскопски данни (ИЧ, Раманови, ЯМР и електронни спектри) и (3) описание на системи в специфична среда (газова фаза, разтвор и твърда фаза).

#### Annotation:

The aim of the course is to present to the PhD students the advanced theoretical and computational methods and their specific applications for investigation of inorganic systems and materials as well as for prediction of their properties from first principles. The atomic scale computer simulations is a powerful tool providing access to the microscopic processes of inorganic systems and can thereby contribute enormously to the understanding of chemical structures, properties and reactions. First-principles methods treat the electrons in the model explicitly (quantum-mechanically) and therefore they provide for accurate description of the electronic structure and chemical bonding of the inorganic systems. The benefit of the computational modeling is that it significantly reduces the time of the materials investigation, describes and predicts properties that are not experimentally accessible and directs the design of materials with novel or improved properties. Therefore, the computational modeling and

simulations are of great importance for the new materials development in different branches of the industry, ecology and medicine in Bulgaria and at European level. The program of the course envisages to illustrate the theoretical basis of the computational methods as well as their application for: (1) modeling of molecules, clusters and periodic systems; (2) simulation of spectroscopic data (IR, Raman, NMR and electronic spectra) and (3) description of systems in specific environment (gas phase, solution and solid state).

### Тема 3.6.6. ПРОБОПОДГОТОВКА В ХИМИЧНИЯ АНАЛИЗ SAMPLE PRE-TREATMENT IN CHEMICAL ANALYSIS

This course may also be held in English, upon request.

Лектор:

Албена Дечева, проф. д-р

Albena Detcheva, Prof. Dr.

Тел. (+359 2)979 2504

E-mail: [albena@svr.igic.bas.bg](mailto:albena@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 12 учебни часа

Анотация:

При определянето на следи от елементи в проби със сложен матричен състав е необходимо анализираната проба да се приведе в подходяща форма, както и да се предприемат мерки за разделяне и концентриране на определяемите елементи с цел да се повиши чувствителността на анализа и да се избегнат или намалят преченията. В курса по Пробоподготовка в химичния анализ са разгледани основите на химичния анализ, различните методи за привеждане на проби в разтвор, както и методите за разделяне и концентриране преди аналитичното определяне. Курсът е предназначен както за докторанти (химици или физици), така и за специалисти, които работят в областта на химичния анализ (следдипломна квалификация).

### Тема 3.6.7. СПЕКТРОСКОПСКИ МЕТОДИ ЗА АНАЛИЗ НА ПОВЪРХНОСТТА И ОБЕМА НА МАТЕРИАЛИТЕ

Лектор:

Радостина Стоянова, проф. д-р

Radostina Stoyanova, Prof. Dr.

Тел. (+359) 2 979 39 15

E-mail: [radstoy@svr.igic.bas.bg](mailto:radstoy@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Концепцията за създаване на нови материали с контролирани свойства и специално предназначение се подчинява на общи принципи, в основата на които е организацията на материята на атомно и молекулно ниво, т.е. локалната им структура. В това отношение използването на спектроскопски методи на анализ позволява директно да се вникне в локалната структура на материалите. Настоящият курс обхваща приложението на основните принципи на спектроскопията при изучаване на взаимовръзката "структура-свойства-реактивоспособност".

Целта на курса е да се задълбочат и разширят познанията на докторантите върху спектроскопските методи за характеризиране на обема и повърхността на материалите, както и да се изградят практически умения за работа със съвременна спектроскопска апаратура.

В курса, обучението ще бъде насочено към усвояването на някои съвременни спектроскопски методи като инфрачервена спектроскопия, рентгенова фотоелектронна спектроскопия, електронен парамагнитен резонанс, ядрено магнитен резонанс в твърдо състояние. В хода на обучението, докторантите ще се запознаят с приложението на ИЧ спектроскопията за анализ на повърхността на материали, както и ще се добият нови знания върху подбора на молекули-сонди и използването на изотопно белязани молекули. В допълнение на ИЧ спектроскопията, ще бъде разгледано използването на рентгенова фотоелектронна спектроскопия за идентифициране, определяне на количеството и химическото състояние на елементите на повърхността. Локалната структура на

материалите в обема и повърхността ще бъде описана въз основа на принципите на електронния парамагнитен резонанс. Ще бъде направен сравнителен анализ на информацията получавана от електронния парамагнитен резонанс и ядрено магнитен резонанс в твърдо състояние.

Предвижда се провеждането на семинари, демонстрации и работа със съвременна апаратура. Наличната в ИОНХ апаратурата е от най-ново поколение и тя ще бъде използвана при практическите упражнения. Специално внимание ще бъде отделено за компютърна обработка и интерпретиране на получените резултати от използвания специфичен аналитичен метод.

За обучение в курса могат да кандидастват не само докторанти, но широк кръг от студенти и специалисти с бакалавърска или магистърска степен по химия, физика, геология, екология, металургия, химични технологии, химия и физика и др. Курсът на обучение предполага да се придобият необходимите познания едновременно в две области, спектроскопия и материалознание, което ще даде предимство на звършилите курса при бъдеща реализация в сферата на малките и средни предприятия, в системата на администрацията (българска и европейска), в научно-изследователски организации и висшите училища, и др.

Курсът ще се проведе от водещи учени и специалисти от ИОНХ.

### [Програма](#)

#### Тема 3.6.9. МЕТОДИ ЗА СИНТЕЗ НА НЕОРГАНИЧНИ МАТЕРИАЛИ

Лектор:

Виолета Колева, проф. д-р

Violeta Koleva, Prof. Dr.

Тел. (+359) 2 979 3566

E-mail: [vkoleva@svr.igic.bas.bg](mailto:vkoleva@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Изборът на метод за синтез е ключов момент при дизайна на нови високотехнологични материали. Лекционният курс има за цел да даде задълбочени фундаментални и научно-приложни знания в областта на синтеза на неорганичните материали, които да подпомогнат докторантите и специалистите в областта на химия, биохимия и физика при избора им на най-подходящ метод за синтез на техните обекти на изследване. В курса се разглеждат и сравняват основните методи на синтез на неорганичните материали. В детайли са разгледани високотемпературни методи като твърдофазен синтез и метод на преохладената стопилка; методи на меката химия като зол-гел, съутаяване, прекурсорни методи, топотоктични реакции; синтез под налягане като хидротермален, солвотермален и др.; механохимичен синтез и др. В лекционния курс се дискутират основните принципи, предимствата и недостатъците на посочените методи за синтез. Показани са възможностите на отделните методи, както и комбинирането им за получаване на неорганични материали с предварително зададени свойства като оптични, електрохимични, електрични, магнитни, каталитични, и др.

### Тема 3.6.10. КВАНТОВО-ХИМИЧНИ МЕТОДИ QUANTUM-CHEMICAL METHODS

Лектор:

Венелин Енчев, проф. дхн

Venelin Enchev, Prof., DSc

Тел. (+359) 2-979-3725

E-mail: [venelin@svr.igic.bas.bg](mailto:venelin@svr.igic.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Курсът "Квантово-химични методи" е предназначен за обучение на докторанти по специалността теоретична химия за образователната и научна степен ДОКТОР. Поради интердисциплинарния характер на научната област, която се засяга в лекциите, те са подходящи за докторанти, специализанти и млади учени, работещи по теми от физичната химия, неорганичната химия, органичната химия, биохимията, катализа, полимери и моделиране на биологични системи.

Целта на курса е да запознае докторантите с теоретичните основи на най-използваните квантово-химични методи за изследване на структурата на различни съединения и моделирането на химични реакции в основно и възбудено състояние, както и симулирането на УВ, ИЧ, Раманови, флуоресцентни и ЯМР спектри. Предвидени са и практически занимания със съвременни квантово-химични програмни пакети.

Материалът на курса е подбран така, че да представлява надстройка над учебните магистърски програми, допринасяща за разработването на научен подход при избора на подходящи квантово-химични методи за изследване с оглед на конкретни практически изисквания.

Annotation:

"Quantum-Chemical Methods" course is intended for the training of PhD students in theoretical chemistry. Due to the interdisciplinary character of the scientific field covered in the lectures, they are suitable for PhD students and young scientists working on topics in physical chemistry, inorganic chemistry, organic chemistry, biochemistry, catalysis, polymers and modeling of biological systems.

The aim of the course is to acquaint the PhD students with the theoretical foundations of the most used quantum-chemical methods for studying the structure of different compounds and modeling chemical reactions in the ground and excited states, as well as simulating the UV, IR, Raman, fluorescence and NMR spectra.

The course is selected to be an upgrade from the Master's degree programs, contributing to the development of a scientific approach in the selection of appropriate quantum-chemical methods of study with regard to specific practical requirements.