



ПЛОВДИВСКИ УНИВЕРСИТЕТ  
"ПАИСИЙ ХИЛЕНДАРСКИ"

България 4000 гр. Пловдив ул. "Цар Асен" № 24; Централна: (032) 261 261  
Ректор: (032) 631 449 факс (032) 628 390 e-mail: rector@uni-plovdiv.bg

---

Х И М И Ч Е С К И   Ф А К У Л Т Е Т

**УТВЪРЖДАВАМ:**

Декан:

(доц. д-р Илиян Иванов)

Ректор:

(доц. д-р Запрян Козлуджов)

**УЧЕБЕН ПЛАН**

**на специалност «Компютърна химия»**

**задочно обучение**

**образователно-квалификационна степен «Магистър»**

Учебният план

е приет на Факултетен съвет с Протокол № 146 / 14. 06. 2012 год.

и одобрен от Академичния съвет с Протокол № 15 / 25. 06. 2012 год.

влиза в сила от учебната 2012/2013 год.

**Факултет**

Химически

**Професионално направление**

4.2. Химически науки

**Специалност**

Компютърна химия

**Форма на обучение**

задочно

**Анотация**

Основната задача на магистърската програма по Компютърна химия е придобиването на знания и усвояването на професионални умения, съобразени със съвременните научни и индустриални стандарти при прилагането на компютърните методи в области като: откриване и дизайн на биологично активни съединения, теоретични химични изчисления, моделиране на физикохимични свойства и биологична активност, компютърно-базирано разкриване на структурите на неизвестни химични съединения, обработка на информацията получена от химичните анализи и др. Лекционните курсове и практическите упражнения ще формират задълбочени познания по химична информатика, статистика, QSAR моделиране, квантово-химични подходи, работа с химически бази данни. Компютърната химия се характеризира с две основни направления: химична информатика и изчислителна химия, а така също и разнообразна палитра от методологии, които професионално се разработват и въвеждат в тези направления. Базовите курсове от първия семестър покриват основополагащите елементи в двете направления. Посредством богат списък от избираеми дисциплини студентите ще имат възможност да задълбочат знанията и уменията си в определени специализирани области: химична информатика, изчислителна (квантова) химия, статистика, метрология и управление на качеството, програмиране на химически софтуер и други компютърни и ИТ направления.

По време на упражненията, студентите от специалност "Компютърна химия" ще работят с висококачествен софтуер за компютърно моделиране в химията, разработен от известни научни групи и софтуерни компании, както и софтуер разработен в Химическия Факултет на ПУ. В практическите занятия и самостоятелните курсови работи студентите ще получават задачи свързани с научно-изследователски проекти, в които участват техните преподаватели и ще имат възможност да работят с професионални химични бази данни, мощни хардуерни изчислителни ресурси и реални данни от съвременни научни проекти.

С усвояения материал студентите ще имат отлично стартово ниво за своето професионално реализиране във фирми и агенции, където се изисква ефективна обработка на химична информация и патенти, в отделите за развитие и иновации (R&D) на фармацевтичните компании и фирми от химическата индустрия, в химични и биохимични лаборатории, където се прилагат съвременни методи за анализ и статистическа обработка на измерените резултати. Също така студентите, които задълбочат своите познания по информатика и програмиране, могат да продължат своята кариера в областта на ИТ технологиите, както и в частност, да работят в компании разработващи софтуер по химична информатика или биоинформатика.

Магистърската програма ще подготви студентите за бъдеща научноизследователска практика, а така също и за продължаване на обучението им в образователна и научна степен доктор.

### Професионална квалификация

Химик – специалист по компютърна химия

### Равнище на квалификация

Образователно-квалификационна степен: „Магистър”

### Специфични изисквания за достъп (прием)

- Дипломирани бакалаври от специалности: Химия, Компютърна химия, Медицинска химия, Химия с маркетинг, Химия и физика, Биология и химия,
- Дипломирани бакалаври от Химико-технологичните университети и Университета по хранителни технологии.

### Ред за признаване на предходно обучение

- ECTS – координатор на Химическия факултет – доц. д-р В. Стефанова; e-mail: [stefanova@uni-plovdiv.bg](mailto:stefanova@uni-plovdiv.bg) дава първоначална информация и насоки за възможностите за признаване и присъждане на кредити от предходно обучение, в зависимост от конкретния случай.
- **Процедури за признаване:**  
**Първи вариант:** Признаване на кредити на база представени документи (академична справка или диплома от предишно обучение) от друго ВУ;  
**Втори вариант:** Признаване на кредити въз основа на представяне на официално издадени международни дипломи и сертификати за предхождащо обучение с пълно описание на наименованието на учебните дисциплини, хорариума и броя ECTS кредити.

### Квалификационни изисквания и правила за квалификация

За придобиване на квалификацията са необходими 75 кредита, от тях 29 кредита от задължителни дисциплини; 15 кредита от избираеми дисциплини; 16 кредита от самостоятелни проекти и научно-изследователска практика и 15 от държавен изпит (или защита на дипломна работа).

### Профил на програмата (специалността)

Учебният план включва 10 дисциплини, от които 5 завършват с изпит и 5 с текуща оценка. Задължителните дисциплини са 38.6% от ECTS кредитите по специалността и се формират от базови курсове по: химична информатика и кватово-химично моделиране. Практическите умения на студентите за самостоятелна работа се формират от включените в учебния план лабораторни упражнения и семинари, които съставляват 53% от общата аудиторна заетост (в този процент не се отчита научно-изследователската практика).

Подготовката на студентите за провеждане на самостоятелно изследване и решаване на реални проблеми в областта на компютърната химия се осигурява от 2 самостоятелни изследователски задачи (научно-изследователска практика I и II част), които съставляват 21.3% от общия брой ECTS кредити.

В учебния план са включени и 3 избираеми дисциплини, които носят 20% от общия брой ECTS кредити.

## Основни резултати от обучението

### Програмно-специфични компетентности на завършилите специалисти

- **Химична информатика и квантова химия**

1. Познания върху основните принципи, методи, понятия и факти в химичната информатика и владееене на професионалния речник в тази област
2. Основите на квантовата механика и съвременните приложения при химичното моделиране
3. Базисни познания за представянето, обработването и анализа на информацията касаеща химичните съединения и химичните реакции
4. Съвременни медоти за статистически анализ и създаване на модели: регресионни подходи, линейни и нелинейни методи, методи за разпознаване на образи, класификация на обекти и кластериране
5. Способност за оценка, интерпретация и обобщаване на химически данни и информация
6. Съвременни химични бази данни
7. Моделиране на физико-химични свойства и биологична активност на химичните съединения
8. Компютърно-базирано разкриване на структурите на неизвестни химични съединения и автоматична интерпретация на спектрална информация.

- **Компютърни**

1. Познания по съвременните операционни системи, основните видове софтуер, съвременните комуникации и Интернет.
2. Практически умения за работа в средата на съвременни операционни системи: обработка на текстови, числени, графични и мултимедийни файлове, създаване на презентации и електронни таблици; използване на основните услуги и протоколи на Интернет.
3. Практически умения за работа с молекулни редактори и средства за визуализация на тримерни структурни модели.
4. Работа със съвременни софтуерни системи по химична информатика и професионален софтуер за компютърно моделиране в химията
5. Програмиране и създаване на скриптове при решаване на проблеми в химичната информатика

## Професионален профил на завършилите

Успешно завършилите магистърската програма по Компютърна химия могат да решават теоретични и практични проблеми във фармацевтичната и химичната индустрия. Усвоените специализирани умения дават на студентите отлична база за професионално реализиране във:

- фирми и агенции, където се изисква ефективна обработка на химична информация и патенти;
- отделите за развитие и иновации (R&D) на фармацевтичните компании и фирми от химическата индустрия;
- химични и биохимични лаборатории, където се прилагат съвременни методи за анализ и статистическа обработка на измерените резултати;
- фирми, научни и академични организации, които се занимават с разработване, внедряване и усъвършенстване на технологии и софтуер за дизайн на лекар-

ствени вещества, нови материали, моделиране и симулиране на процеси, създаване на програми и бази от данни, експертни системи и др.;

- научно-приложни изследвания в сферата на химията, фармацевтиката, биотехнологиите, нанотехнологиите, информатиката, екологията.

Също така студентите, които са задълбочили своите познания по информатика и програмиране, могат да продължат своята кариера в областта на ИТ технологиите, както и в частност да работят в компании разработващи софтуер по химична информатика или биоинформатика.

Многобройните възможности за професионална реализация произтичат преди всичко от универсалната приложимост на получените знания по компютърна химия.

### **Възможности за продължаване на обучението**

Успешно завършилите студенти могат да продължат обучението си за получаване на образователно-научната степен "Доктор", по обявените докторантски програми в Химическия факултет на ПУ.

Дипломираните Магистри могат да продължат образованието си в други висши училища в страната или в чужбина, които имат акредитирани докторантски програми за професионално направление 4.2. Химически науки.

**Диаграма на структурата на курсовете с кредити  
за специалност Компютърна химия  
задочно обучение**

№	Код по ECTS	Учебен курс/дисциплина	Аудиторни				Извън-аудиторна	Общо	К	Фи
			АО	Л	С	ЛБ				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	11	12
<b>1-ви семестър</b>										
1		Компютърна обработка на структурна и химична информация	40	20	20	0	170	210	7	И
2		Квантово-химично моделиране	40	10	0	30	170	210	7	И
3		Химически бази данни	30	15	15	0	120	150	5	И
4		Избираема дисциплина I	30	15	0	15	120	150	5	Т
5		Научно-изследователска практика I	60	0	0	60	120	180	6	Т
<b>Общо за 1-ви семестър</b>			<b>200</b>	<b>60</b>	<b>35</b>	<b>105</b>	<b>700</b>	<b>900</b>	<b>30</b>	
<b>2-ри семестър</b>										
1		QSAR – моделиране на количествена връзка между структура и биологична активност	40	20	20	0	110	150	5	И
2		Компютърни методи за обработка и интерпретация на спектрална информация	50	25	5	20	100	150	5	И
3		Избираема дисциплина II	30	15	15	0	120	150	5	Т
4		Избираема дисциплина III	30	15	15	0	120	150	5	Т
5		Научно-изследователска практика II	100	0	0	100	200	300	10	Т
<b>Общо за 2-ри семестър</b>			<b>250</b>	<b>75</b>	<b>55</b>	<b>120</b>	<b>650</b>	<b>900</b>	<b>30</b>	
<b>Общо за целия курс на обучение:</b>			<b>450</b>	<b>135</b>	<b>90</b>	<b>225</b>	<b>1350</b>	<b>1800</b>	<b>60</b>	
<b>Форма на дипломиране:</b>			Държавен изпит (писмен) или защита на дипломна работа						15	
<b>Общ брой кредити:</b>			<b>75</b>							

Студентите избират 1 учебна дисциплина от Блок А и 2 учебни дисциплини от Блок Б										
Блок А										
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1		Компютърен достъп до научна информация	30	15	0	15	120	150	5	Т
2		Компютърни мрежи и интернет – съвременни тенденции	30	15	0	15	120	150	5	Т
3		Операционни системи	30	15	0	15	120	150	5	Т
Блок Б										
1		Симетрия в химията	30	15	15	0	120	150	5	Т
2		Статистическа обработка на данни и моделиране със системата „R”	30	15	15	0	120	150	5	Т
3		Метрология и управление на качеството	30	15	15	0	120	150	5	Т
4		Програмиране и алгоритми в химията	30	15	15	0	120	150	5	Т
5		Софтуер с отворен код в химичната информатика	30	15	15	0	120	150	5	Т

Легенда:	
Аудиторни часове в семестъра:	АО – общ брой, от тях Л – за лекции; С – за семинари; Лб – лабораторни упражнения.
Извънаудиторни часове в семестъра:	Сп – за самостоятелна подготовка
Други означения	К – ECTS кредити; Фи – форма на изпитване (със стойности И – изпит, Т – текуща оценка)

**Правила за изпитите, оценяване и поставяне на оценки:**

Всички изпити са писмени и се провеждат в рамките на сесията след края на семестъра. Формата на провеждане на изпита зависи от спецификата на дисциплината и може да бъде:

- писмена работа върху обявен изпитен конспект;
- тест, включващ активни и/или пасивни въпроси;
- решение на проблем или задачи.

За всяка дисциплина се обявяват най-малко две допълнителни дати за изпит. През семестъра се провеждат колоквиуми, контролни, или курсови работи, които са съобразени със спецификата на изучаваните дисциплини и са обявени в съответната учебната програма на курса. Чрез осъществяване на текущ контрол в рамките на семестъра се създава възможност студентите да организират по-добре времето си и да усвоят задълбочено изучаваната материя.

Критериите за формиране на оценката, както и степента на тежест, с която резултатите от текущ контрол на знанията на студентите се включват в крайната оценка, зависят от спецификата на изучаваната дисциплина и се обявяват в учебната програма на всяка учебна дисциплина.

Студентите могат да се запознаят с резултатите от всяка писмена работа (изпитна или от текущ контрол) и да получат мотивираното мнение на оценяващия преподавател.

Писмените материали от проверката на знанията и уменията се съхраняват за срок не по-малък от една година от провеждането на изпита.

Държавните изпити и защитите на дипломни работи се провеждат от Държавна изпитна комисия, назначена със заповед на Ректора.

#### **Изисквания за завършване:**

- Успешно положени семестриални изпити
- Успешно положен писмен Държавен изпит по обявена програма по Компютърна химия или защита на Дипломна работа

#### **Директор (или отговорник) на програмата:**

Ръководител на програмата: доц. д-р Николай Кочев

Телефон: 032/ 261 447

e-mail: [nick@uni-plovdiv.net](mailto:nick@uni-plovdiv.net)