



КОНСПЕКТ
за конкурснен изпит за докторантура по
ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ
МОДУЛ „КВАНТОВА ХИМИЯ”

1. УРАВНЕНИЕ НА ШРЪДИНГЕР ЗА ВОДОРОДНИЯ АТОМ. Решения на вълновото уравнение за атома на водорода. Квантови числа. Спин. Спин-орбитала.
2. МНОГОЕЛЕКТРОННИ АТОМИ. Векторен модел на атома. Принцип на изграждане на електронните конфигурации на многоелектронни атоми. Атомни термове.
3. ВАРИАЦИОНЕН ПРИНЦИП И ТЕОРИЯ НА ПЕРТУРБАЦИИТЕ. Вариационна теорема. Видове пертурбации при спрегнати системи.
4. ЕЛЕМЕНТИ НА МОЛЕКУЛНАТА СИМЕТРИЯ. Видове конфигурации. Елементи и операции на симетрия. Точкови групи на симетрия.
5. НЕРАЗЛОЖИМИ И РАЗЛОЖИМИ ПРЕДСТАВЯНИЯ. Матрично представяне на операциите на симетрия чрез преобразуване на координатите на атомите. Характер на преобразуване. Извеждане на неразложимите представяния на точковата група C_{2v} .
6. ТЕОРИЯ НА ВАЛЕНТНИТЕ ВРЪЗКИ. Приближение на Борн – Опенхаймер. Електронен строеж на водородната молекула. Квантовохимичен резонанс. Хибридизация на атомни орбитали.
7. МЕТОД НА МОЛЕКУЛНИТЕ ОРБИТАЛИ. Основни положения. Електронен строеж на катиона на водородната молекула (приложение на вариационния принцип). Припокриване на АО – интеграл на припокриване. Видове химични връзки.
8. П-ЕЛЕКТРОННО ПРИБЛИЖЕНИЕ. Метод на Хюкел. Молекули на етен, бутадиен и бензен. Енергия на делокализация. Енергия на $\pi \rightarrow \pi^*$ електронния преход в бензена.
9. ТОПОЛОГИЧНИ СВОЙСТВА НА СПРЕГНАТИТЕ СИСТЕМИ. Моно- и полициклични спрегнати системи. Правило на Хюкел за ароматност.
10. СТАТИСТИЧЕСКА ТЕРМОДИНАМИКА. Статистическа сума. Молекулна сума на състоянието – постъпателна, ротационна, вибрационна, електронна. Изчисляване на термодинамични функции по статистически суми.

Литература

1. В. Делчев, Квантова химия, ПУ, 2016.
2. В. Делчев, Квантовохимични методи, ПУ, 2010.
3. Г. Николов, Основи на квантовата химия и строеж на веществото, ПУ, 1996.
4. Н. Тютюлков, Теория на молекулните орбити, Наука и изкуство, София, 1970.
5. Н. Тютюлков, Квантова химия, Наука и изкуство, София, 1978.
6. Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер, Теория валентности, Мир, Москва, 1968.
7. W. Moor, Physical Chemistry, Longman, London, 1972.

Изготвил:
(проф. дхн. В. Делчев)

Ръководител катедра ФХ:
(доц. д-р Н. Димчева)