



ПРОГРАМА

за провеждане на конкурсен изпит по докторска програма
ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ, МОДУЛ „КВАНТОВА ХИМИЯ“

- 1. ПРОСТИ КВАНТОВИ СИСТЕМИ.** Твърд ротатор – решаване на вълновото уравнение, сферични хармоници, ротационна енергия. Хармоничен осцилатор – вибрационно квантово число, вибрационни вълнови функции.
- 2. УРАВНЕНИЕ НА ШРЪДИНГЕР ЗА ВОДОРОДНИЯ АТОМ.** Решения на вълновото уравнение за атома на водорода. Ъглова и радиална вълнова функция.
- 3. КВАНТОВИ ЧИСЛА.** Главно, орбитално и магнитно квантово число. Орбитален и спинов момент на импулса – ориентации и проекции. Спин. Спин-орбитала.
- 4. МНОГОЕЛЕКТРОННИ АТОМИ.** Атом на хелия – вълнова функция и оператор на Хамилтон. Вариационна и пертурбационна теория.
- 5. ЕЛЕКТРОННИ КОНФИГУРАЦИИ И ТЕРМОВЕ.** Векторен модел на атома – LS и jj-схема. Принцип на изграждане на електронните конфигурации на многоелектронни атоми. Атомни термове.
- 6. МОЛЕКУЛНА СИМЕТРИЯ.** Видове конфигурации. Елементи и операции на симетрия. Точкови групи на симетрия.
- 7. 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} .
- 8. ТЕОРИЯ НА ВАЛЕНТНИТЕ ВРЪЗКИ.** Приближение на Борн – Опенхаймер. Представи на Люис за образуване на химични връзки. Електронен строеж на водородната молекула.
- 9. НАДГРАЖДАНЕ НА ПРЕДСТАВИТЕ ЗА ВАЛЕНТНИ ВРЪЗКИ.** Квантово-химичен резонанс – канонични структури и резонансен хибрид. Хибридизация на атомни орбитали. Теория на локализираните електронни двойки.
- 10. МЕТОД НА МОЛЕКУЛНИТЕ ОРБИТАЛИ.** Основни положения. Електронен строеж на катиона на водородната молекула. Кулонови и резонансни интеграли. Интеграл на припокриване.
- 11. ПРИПОКРИВАНЕ НА АО.** Видове химични връзки – σ -, π - и δ -връзки. Строеж на молекулните системи H_2^+ , H_2 , He_2^+ и He_2 – молекулна диаграма, порядък на връзката.

12. π -ЕЛЕКТРОННО ПРИБЛИЖЕНИЕ. Метод на Хюкел. Молекули на етен, бутадиен и бензен. Енергия на делокализация. Енергия на $\pi \rightarrow \pi^*$ електронния преход в бензена.

13. ИЗЧИСЛЕНИЯ В π -ЕЛЕКТРОННО ПРИБЛИЖЕНИЕ. Изчисляване на заряда на атомите, порядъка на връзките и индекса на свободна валентност.

14. ТОПОЛОГИЧНИ СВОЙСТВА НА СПРЕГНАТИТЕ СИСТЕМИ. Моно- и полициклични спрегнати системи. Правило на Хюкел за ароматност.

15. СТАТИСТИЧЕСКА ТЕРМОДИНАМИКА. Статистическа сума. Молекулна сума на състоянието – постъпателна, ротационна, вибрационна, електронна. Изчисляване на термодинамични функции по статистически суми.

16. ТЕОРИЯ НА КРИСТАЛНОТО ПОЛЕ. Разцепване на d-АО в поле на лиганди с различна симетрия. Ниско- и високоспинови комплекси. Спектрохимичен ред.

17. ТЕОРИЯ НА ЛИГАНДНОТО ПОЛЕ. Нефелоксетичен ред на лигандите. Параметър на ковалентност. Ефект на Ян-Телер.

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. Г. Николов, Структура и свойства на координационните съединения, Наука и изкуство, София, 1977.
5. Н. Тютюлков, Теория на молекулните орбити, Наука и изкуство, София, 1970.
6. Н. Тютюлков, Квантова химия, Наука и изкуство, София, 1978.
7. Дж. Маррел, С. Кетл, Дж. Теддер, Теория валентности, Мир, Москва, 1968.
8. W. Moor, Physical Chemistry, Longman, London, 1972.

Изготвил:
(проф. дхн. В. Делчев)

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