



## Раздел 2: ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА НА МОЛЕКУЛИТЕ. ПРИРОДА НА ХИМИЧНАТА ВРЪЗКА

### **6. Общи положения**

Общи положения за природата на химичната връзка. Приближение на Борн-Опенхаймер. Йонна връзка.

### **7. Теория на валентните връзки**

Теория на валентните връзки. Хибридизация на атомни орбитали. Теория на локализираните електронни двойки. Квантовохимичен резонанс.

### **8. Метод на молекулните орбитали**

Линейна комбинация от атомни орбитали. Припокриване на атомни орбитали. Молекулен йон на водорода. Метод на МО за многоелектронни системи. Класификация на молекулните орбитали.

### **9. Емпирични методи**

Метод на Хюкел. Разширен метод на Хюкел. Теория на кристалното поле.

### **10. Неемпирични методи**

Основни положения. Базисни функции – минимален и разширен. Методи за оценка на електронната корелация.

### **11. Теория на функционала на плътността**

Основни положения. Теорема на Хоенберг-Кон. Формализъм на Кон-Шам. Функционали на плътността.

## Раздел 3: СТРОЕЖ И СВОЙСТВА НА МОЛЕКУЛИТЕ

### **12. Енергетичен спектър на молекулите**

Електронни, вибрационни, ротационни състояния на молекулите; класификация на електронни състояния и електронни преходи в многоатомни молекули; теория на електронните спектри; интензивност на електронните преходи - диполен момент на прехода. Правила за отбор. Забранени преходи и роля на спин-орбиталното взаимодействие. Принцип на Франк-Кондон.

### **13. Молекулни вибрации. Вибро-електронно взаимодействие**

Молекулни вибрации и хармонично приближение. Вибрационни и ротационни състояния на многоатомните молекули - отборни правила за преход. Ефект на Ян-Телерот първи род. Ефект на Ян-Телер от втори род. Статичен и динамичен ефект на Ян-Телер.

### **14. Елементарни фотофизични процеси**

Абсорбционни и емисионни спектри. Закон на Стокс. Диаграма на Яблонски. Излъчвателна и безизлъчвателна дезактивация. Вътрешна и интеркомбинационна конверсия. Време на живот на електронно-възбудените състояния. Пренос на енергия.

### **15. Квантова теория на реакционната способност**

Микроскопски и макроскопски характеристики на химичните процеси; квантова теория на елементарния акт на химичните процеси; класификация и механизъм на елементарните процеси; енергетични повърхности; изчисление на активиращата енергия; енергетична повърхност на реакция.

*Литература:*

1. Г. Николов, “Основи на квантовата химия и строеж на веществото”, Пловдивско Университетско издателство, Пловдив, 1996 г.
2. Н. Тютюлков, “Строеж на молекулите”, Университетско издателство, “Св. Климент Охридски”, София, 1995 г.
3. Г. Николов, „Структура и свойства на координационни съединения“, Изд. Наука и изкуство, София, 1977 г.
4. В. Делчев, “Квантова химия“, Университетско издание „Паисий Хилендарски“ 2016.
5. Стефан Иванов, „Основи на теоретичната и квантовата механика“, София, 1999.
6. Vincenzo Balzani, Paola Ceroni and Alberto Juris, „Photochemistry and Photophysics: Concepts, Research, Applications“, First Edition, 2014 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co.
7. Ф. Даниелс, Р. Олбери, „Физическая химия“, 1978.
8. K. I. Ramachandran · G. Deepa · K. Namboori, „Computational Chemistry and Molecular Modeling, Principles and Applications“, 2008 Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
9. Christopher J. Cramer, „Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models“, II Ed., J. Wiley&Sons, 2004.

Приета на Научен съвет

с Протокол №13 от 28.10.2021 г.