



КОНСПЕКТ

по Квантова химия, спец. “Компютърна химия”

1. Оператори – линейни и ермитови оператори. Оператор на Хамилтон.
2. Прости квантови системи - твърд ротатор, хармоничен осцилатор.
3. Решаване на вълновото уравнение за атома на водорода. Водородоподобни атомни орбитали.
4. Свойства на вълновите функции. Орбитали, електронен облак. Нормираност и ортогоналност на вълнови функции.
5. Квантови числа. Спин. Спин-орбитала.
6. Многоелектронни атоми – атом на хелия.
7. Векторен модел на атома. Схема на Ръсел – Сонгерс (LS - схема) и j-j схема.
8. Принцип на изграждане на електронните конфигурации на многоелектронни атоми. Атомни термове.
9. Атомни спектри. Правила на Лапорт.
10. Видове конфигурации. Елементи и операции на симетрия.
11. Точкови групи на симетрия.
12. Матрично представяне на операциите на симетрия чрез преобразуване на координатите на атомите .
13. Характер на преобразуване. Неразложими и разложими представяния.
14. Електронен строеж на молекулите. Приближение на Борн – Опенхаймер.
15. Теория на валентните връзки – основни положения. Електронен строеж на водородната молекула.
16. Квантовохимичен резонанс. Канонични структури. Резонансен хибрид.
17. Хибридизация на АО. Еквивалентни и нееквивалентни хибридни орбитали.
18. Метод на молекулните орбитали – основни положения. Електронен строеж на катиона на водородната молекула.
19. Припокриване на АО – интеграл на припокриване. Видове химични връзки.
20. Електронна структура на хомоягрени гвуатомни молекули. Молекула на водорода и молекули на елементите от Li до Ne.
21. Електронна структура на хетероягрени гвуатомни молекули.
22. Геометричен строеж на молекули с атоми със свободни електронни двойки. Теорема на Гилеспи – Найхолм.

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. Марсел, С. Кеттл, Дж. Тедгер, Теория валентности, Мир, Москва, 1968.
7. W. Moor, Physical Chemistry, Longman, London, 1972.
8. П. Райчев, Физика на атомните системи, Наука и изкуство, София, 1980.