



Докторска програма “Теоретична химия“

КОНСПЕКТ

за кандидат-докторантски изпит
в рамките на проект ИНТЕРДОК BG05SFPR001-3.004-0004-C01

2024/2025 учебна година

- 1. Квантова теория за строежа на веществата**
Уравнение на Шрьодингер. Решения – енергия и вълнова функция. Орбитали. Квантови числа. Енергетични състояния. Енергетичен спектър на многоелектронни системи – принцип на построяването, мултиплетност.
- 2. Основни приближения и методи в квантовата химия**
Едноелектронно приближение; енергия на електронна корелация. Приближение на Борн-Опенхаймер. Спин-орбитално приближение. Нерелативистично приближение. Метод на Хартри-Фок. Теория на функционала на плътността.
- 3. Основни физически модели и математически методи в квантовата химия**
Базисни функции. Теория на молекулните орбитали. Модел на валентните връзки. Сравнение на моделите. Вариационен метод.
- 4. Основни постановки от статистическата термодинамика**
Вероятностни разпределения. Термодинамични ансамбли – микроканоничен, каноничен, изобарно-изотермичен, голям каноничен; суми на състоянието, характеристични физикохимични функции. Средна стойност по ансамбъл. Ергодна хипотеза. Средни стойности на термодинамични величини.
- 5. Класическа молекулна динамика – основни положения**
Уравнения за движение на Нютон и Хамилтън. Еквивалентност на представянията. Алгоритъм на молекулнодинамична симулация. Закони за запазване. Области на приложение.
- 6. Ковалентна връзка**
Систематика на състоянията в молекулите – сигма-, пи-, делта- връзки. Молекулен ефект на Щарк. Електронен строеж на двуатомни и многоатомни молекули. π -Електронно приближение. π -Спрежение, колективни ефекти; делокализация на връзките и неадитивност в свойствата. Правило на Хюкел - ароматност, псевдоароматност и антиароматност.
- 7. Геометрична конфигурация на многоатомни молекули**
Геометрична конфигурация на молекулите; геометрична оптимизация.
- 8. Разпределение на електронната плътност**
Атомни заряди. Спинови плътности. Порядък на химичните връзки. Връзка с реактивоспособност.



9. Електрични свойства на молекулите

Диполен момент и молекулна геометрия. Електрична поляризуемост. Анизотропия на поляризуемостта. Квантовохимично пресмятане на диполен момент и поляризуемост.

10. Междумолекулни сили

Корелационен характер на междумолекулните взаимодействия. Енергия на ориентационно, индукционно и дисперсионно взаимодействие. Потенциал на Ленард-Джоунс. Водородна връзка – условия за образуване и характеристики.

11. Молекулни спектри

Електронни, вибрационни, ротационни състояния на молекулите. Класификация на електронни състояния и електронни преходи в многоатомни молекули; диполен момент на прехода и сила на осцилатора; принцип на Франк-Кондон; цвят и строеж на химичните съединения. Схема на Яблонски. Вътрешномолекулен и междумолекулен пренос на енергия във възбудено състояние, екситони. Вибрационни състояния на многоатомните молекули – енергия и отборни правила за преход.

12. Термодинамични принципи на агрегацията в разтвори на амфибилни молекули

Геометрични условия за образуване на сферични мицели, цилиндрични мицели и везикули.

13. Повърхностно напрежение и адсорбция от разтвори на повърхностно-активни вещества

Термодинамика на адсорбцията. Моделни адсорбционни изотерми (Лангмюр, Фрумкин, Фолмер и ван дер Ваалс).

14. Молекулна структура и топология на НК.

Организация на генома. Организация на клетъчната ДНК в хромозоми. Хроматин – състав и структура. Хистонови и нехистонови белтъци. Нива на организация. Молекулна дефиниция на ген. Бактериални оперони и полицистронни иРНК гени. Еукариотни гени, прости и сложни транскрипционни единици. Единични гени, генни фамилии, тандемно повторени гени.

15. Ендоплазмен ретикулум – структура и функции. Синтез и модификация на белтъците в ендоплазмения ретикулум.

16. Апарат на Голджи – структура и функции. Транспорт на белтъци от ЕПР до АГ. Постранслационни модификации на белтъците в АГ.

17. Междуклетъчна сигнализация. Общ преглед на екстрацелуларните сигнали. Рецептори и хормони. Рецептори, свързани с G-белтъци и ефектори.

18. Рецептори със собствена ензимна активност. Рецептори, асоциирани с ензими.

19. Вторични посредници. Регулация на сигналните пътища. Сигнали от клетъчната мембрана към ядрото.

20. Подходи за въвеждане на хетероложна ДНК в прокариотни клетки.



21. Подходи за въвеждане на хетероложна ДНК в еукариотни клетки.
22. Подходи за *in vitro* мутагенеза на белтъци.
23. Подходи за експресия на рекомбинантни белтъци в прокариоти и еукариоти.
24. Подходи за изолиране и пречистване на рекомбинантни белтъци.
25. Биологични подходи за анализ на макромолекулни взаимодействия.

Библиография:

1. P. Atkins, J. de Paula, J. Keeler, *Atkins' Physical Chemistry*, Oxford University Press, 2022.
2. Н. Тютюлков, *Строеж на молекулите*, Университетско издателство "Св. Климент Охридски", София, 2007 г.
3. M. Silberberg, *Chemistry – the molecular nature of matter and change*, VII Ed., The McGraw-Hill Education Inc., 2015.
4. M. Allen, D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, 2017.
5. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, III Ed., J. Wiley & Sons, 2017.
6. J. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, 3rd ed., Academic Press, London, 2011.
7. K. S. Birdi (Ed.), *Handbook of Surface and Colloid Chemistry*, Chapter 11, CRC Press, New York, 1997.
8. B. Alberts et al., *Molecular Biology of the Cell*, 5th ed., Garland Science, 2017.
9. H. Lodish et al., *Molecular Cell Biology*, W. H. Freeman, 2016.
10. B. Lewin, *Genes IX*, Jones & Bartlett Publishers, 2007.
11. D. Nicols, *An Introduction to Genetic Engineering*, Cambridge University Press, 2002.
12. S. B. Primrose, R. M. Twyman, *Principles of Gene Manipulation and Genomics*, Wiley-Blackwell 2006.
13. T. Brown, *Gene Cloning and DNA Analysis*, Wiley-Blackwell, 2010.
14. S. Brakmann, A. Schwienhorst (Eds), *Evolutionary Methods in Biotechnology*, Wiley-WCH 2004.
15. S. J. Park, J. R. Cochran, *Protein Engineering and Design*, CRC Press, 2009.
16. J. Braman (Ed.), *In Vitro Mutagenesis Protocols*, Humana Press, 2002.
17. A. Lorence (Ed.), *Recombinant Gene Expression*, Humana Press 2011.

Дата: 14. 01. 2025 г.

Съставили: проф. Анела Иванова, проф. Славка Чолакова, доц. Иванка Цачева