**Конспект**

**за конкурсен изпит за докторантура по 4.2. Химически Науки /Теоретична Химия**

1. Квантова теория на атома. Водороден атом, многоелектронни атоми. Спин-орбитално взаимодействие. Електронна енергия на атома.
2. Теория на молекулните орбитали. Приближение на Борн-Опенхаймер. Метод на Хартри-Фок.
3. Полуемпирични квантово-химични методи: CNDO, MNDO, АМ1 и РМ3.
4. Абсолютни /ab initio/ методи. Приближение на атомните орбитали с аналитични функции – Слейтърови и Гаусови орбитали. Видове базисни функции: минимален набор от базисни функции; поляризационни базисни функции; дифузни функции.
5. Методи за отчитане на електронната корелация. Метод на конфигурационното взаимодействие. Теория на Мьолер-Плесет.
6. Теория на плътностния функционал. Методи от първо, второ и трето поколение.
7. Отчитане ефекта на разтворителя посредством теоретични подходи.
8. Химична термодинамика. Пресмятане на реакционна енталпия, ентропия и свободна енергия чрез квантово-химични методи.
9. Химична кинетика. Теория на преходното състояние. Проследяване на реакционен път чрез квантово-химични изчисления.
10. Теоретични методи, използващи класически силови полета – молекулна механика. Хибридни методи – QM/MM.
11. Съединения с координационна връзка. Координационно число. Теория на кристалното поле. Теория на лигандното поле.
12. Аминокиселини, пептиди и белтъци. Първична, вторична, третична и четвъртична структура на белтъците. Методи на изследване. Нагъване на протеините – модели.
13. Ензими. Механизъм на ензимното действие. Контрол на ензимната активност. Инхибитори.
14. Нуклеотиди и нуклеинови киселини. Структура на ДНК и РНК. Биосинтез на протеини.
15. Клетъчни мембрани – структура и функция. Йонни канали. Хормони. Предаване на сигнали в клетките.

# *Литература*

1. Н. Тютюлков, *“Квантова химия”*, Наука и изкуство, 1978.
2. Ст. Иванов, *“Основи на теоретичната и квантова механика”, Университетско издателство“*, СУ “Св. Климент Охридски”, София, 1998.
3. П. Эткинс, *“Физическая химия”*, Мир, Москва, 1980.
4. J.B. Foresman and A. Frisch, *“Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods”,* Gaussian, Inc., Pittsburg, PA, 1996.
5. S.S. Shaik, H.B. Schlegel and S. Wolfe, *“Theoretical Aspects of Physical Organic Chemistry”*, John Wiley & Sons, New York, 1992.
6. K.I. Ramachandran, G. Deepa and K. Namboori, *“Computational Chemistry and Molecular Modeling”*, Springer, Berlin, 2008.
7. D.L. Nelson, A.L. Lehringer and M.M. Cox, *“Lehninger Principles of Biochemistry*”, 5th Edition, W.H. Freeman, New York, 2008.