



## ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

email: [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
тел.: 02 987 31 67  
02 979 52 60

### Основна информация:

Име на курса: КВАНТОВО-ХИМИЧНИ ПРЕСМЯТАНИЯ НА ЯМР ПАРАМЕТРИ

Лектор: Проф. д-р Николай Василев

Телефон: 960 6172

Имейл: [Nikolay.Vassilev@orgchm.bas.bg](mailto:Nikolay.Vassilev@orgchm.bas.bg)

Хорариум: 30 учебни часа

### Анотация:

Курсът "Квантово-химични пресмятания на ЯМР параметри" е предназначен за обучение на докторанти по специалността ТЕОРЕТИЧНА ХИМИЯ (01.05.01) за образователната и научна степен ДОКТОР. Курсът е посветен на съвременните квантово-химични методи за изчисляване на ЯМР химични отмествания и константи на спин-спиново взаимодействие. В курса е включено изучаването на нерелативистичната и релативистичната теория на ЯМР параметрите, разгледано е изчисляването на химичните отмествания и константите на спин-спиново взаимодействие с полуемпирични методи, с методите на Хартри-Фок и на функционала на плътността, както и отчитането на електронната корелация. Отделено е внимание на отчитането на влиянието на разтворителя като диелектрик при пресмятанията на ЯМР параметрите, включването на ротиращи корекции, релативистични пресмятания и т.н.

### Тематично съдържание на курса:

Тема 1. Въведение в квантово-химичните пресмятания на ЯМР параметрите

Тема 2. Изчисляване на химични отмествания и на константи на спин-спиново взаимодействие.

Тема 3. Отчитане на влиянието на разтворителя при пресмятането на ЯМР параметрите.

Тема 4. Пресмятания на ЯМР параметрите при условията на периодична ограниченост.

### Форми на обучение и оценяване:

Обучението се провежда под формата на лекции.

Оценяването се осъществява чрез обсъждания на приложението на разглежданите методи върху конкретен проблем.

### Компетентности, придобити в резултат на обучението:

- 1) Познаване на основните принципи на квантово-химичните пресмятания на ЯМР параметрите, наличните подходи и области на приложение.
- 2) Разбиране на теоретичните основи, възможностите и ограниченията на тези пресмятания за предсказване на експерименталните ЯМР параметри.
- 3) Умение за подготовка, анализ и интерпретация на резултати на квантово-химичните пресмятания на ЯМР параметри.

### Литература:

1. D.C. Young, "Computational Chemistry", Wiley, 2001.



## **ЦЕНТЪР ЗА ОБУЧЕНИЕ – БАН**

1000 София  
ул. „Сердика“ № 4  
<http://edu.bas.bg>

*email:* [tdc-phd@cu.bas.bg](mailto:tdc-phd@cu.bas.bg)  
*тел.:* 02 987 31 67  
02 979 52 60

---

2. М. Каупп, М. Bühl, V. G. Malkin, “Calculation of NMR and EPR Parameters”, Wiley, 2004.

### **Допълнителна информация:**

Необходими са предварителни знания по органична химия и теоретична химия, както и знания за основите на ЯМР спектроскопията.