

Перелік питань які виносяться на екзамен «Квантова хімія»

1. Порівняйте опис атома водню в моделі Бора й у квантовій механіці.
2. Квантовомеханічний опис структури атома та його спектрів. Рівняння Шредінгера.
3. Рівняння Шредінгера для Атома водню. Фізичний смисл квантових чисел. Залежність радіальної складової хвильової функції від відстані між ядром і електроном при різних квантових числах. Атомна система одиниць.
4. Атом водню в квантовій механіці. Аналіз кутової складової. s -, p -, d -атомні орбіталі. Повні хвильові функції атома водню.
5. Квантовомеханічний опис атома водню. Спін електрона.
6. Приведіть визначення атомної орбіталі. Як позначають атомні орбіталі?
7. Квантовомеханічна багаточасткова проблема в контексті електронної структури багатоелектронного атому.
8. Атом гелію. Ортогелій, парагелій. Основи квантово-механічної теорії збурень. Застосування теорії збурень до атома гелію. Основний стан атома гелію.
9. Утруднення точного опису двоелектронного атому. Теорія збурень, варіаційний принцип.
10. Які переваги варіаційного методу? У яких задачах застосовується теорія збурень?
11. Запишіть рівняння для знаходження варіаційних коефіцієнтів, якщо пробна функція подається у вигляді лінійної комбінації двох базисних функцій.
12. Запишіть рівняння нульового і першого порядків для знаходження перших поправок у теорії збурень. Одержіть вираз для першої поправки до енергії.
13. Складіть детермінанти Слейтера для основного і збудженого станів атома гелію. Як розрізняються хвильові функції синглетного і триплетного станів?
14. Яка послідовність розрахунків за методом самоузгодженого поля? Коли припиняється ітераційна процедура?
15. Сформулюйте правила заповнення АО електронами (принцип найменшої енергії, принцип Паулі, правило Хунда).
16. Предмет квантової механіки і квантової хімії. Основні етапи розвитку квантової теорії. Головні тенденції в розвитку квантової хімії. Сучасні можливості і застосування при вирішенні хімічних задач.

17. Метод самоузгодженого поля та його застосування до атома гелія. Рівняння Хартрі та їх зв'язок з варіаційним принципом.
18. Метод Хартрі-Фока розрахунку електронної структури багатеелектронного атому.
19. Застосування комп'ютерних програм для квантово-хімічних розрахунків властивостей багатеелектронних атомів методом Хартрі-Фока. Функції Слейтера. Порівняння результатів хартрі-фоковських розрахунків атомів з експериментом.
20. Принцип Паулі. Періодична система елементів. Векторна модель атома. Терми. Спін-орбітальна взаємодія.
21. Який вигляд має повна хвильова функція молекулярної системи в адіабатичному наближенні? Запишіть молекулярне, електронне і ядерне рівняння для системи, що містить N електронів і M ядер.
22. Хімічний зв'язок в в йонних сполуках. Двоатомні йонні молекули. Спорідненість до електрона. Електронегативність.
23. Утворення молекул з йонів. Потенціали іонізації атомів та йонів. Зміна потенціалів іонізації в групі та за періодом.
24. Молекула водню. Метод Гайтлера-Лондона. Метод валентного зв'язку. Порівняння результатів розрахунків H_2 методом Гайтлера-Лондона з експериментом. Валентність.
25. Квантова механіка утворення молекули водню. Хвильові функції молекули водню. Суть методу валентних зв'язків.
26. Метод молекулярних орбіталей. Молекулярний іон водню H_2^+ . Розрахунок двоатомних молекул в наближенні лінійної комбінації атомних орбіталей (ЛКАО). Рівняння Рутана.
27. Молекулярні орбіталі для гомоядерних молекул. Двоатомні молекули другого періоду в методі МО ЛКАО.
28. Розрахунок геометрії хімічного зв'язку методом валентних зв'язків.
29. Порівняйте опис хімічного зв'язку в молекулі H_2 у методах МО і ВС. У якому з них коректно описується процес дисоціації?
30. Застосування комп'ютерних програм для квантово-хімічних розрахунків властивостей двоатомних молекул методом Хартрі-Фока. Мінімальний базис.
31. Напівемпіричні методи розрахунку молекул в рамках МО ЛКАО. Ідея нульового диференціального перекриття.
32. Викладіть основні положення методу МО ЛКАО. Чи є він точним методом? Назвіть джерела помилок методу. Наведіть обґрунтування методу.
33. Охарактеризуйте наближення МО ЛКАО. Наведіть приклади базисних функцій. Що означають терміти валентний базис, мінімальний базис, розширений базис.
34. Які орбіталі називають орбіталями слейтерівського типу?
35. Які квантово-хімічні методи називаються неемпіричними («ab initio»), напівемпіричними? Що означає термін «ab initio»?

36. Поняття про теорію функціоналу електронної густини.
37. Класифікація конденсованих систем за типами хімічного зв'язку. Хімічний зв'язок в іонних сполуках. Молекулярні конденсовані системи. Водневий зв'язок. Ковалентний зв'язок в твердих тілах. Металічні кристали.