

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

## Екзаменаційний білет № 1

1. Яка послідовність розрахунків за методом самоузгодженого поля? Коли припиняється ітераційна процедура?
  2. Атом водню в квантовій механіці. Аналіз кутової складової.  $s$ - ,  $p$ - ,  $d$ -атомні орбіталі. Повні хвильові функції атома водню.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

**Завідувач кафедри:** \_\_\_\_\_ **Халатов А. А.** **Екзаменатор:** \_\_\_\_\_ **Пономаренко С. М.**  
(підпис) (прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

## Екзаменаційний білет № 2

1. 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.
  2. Молекула водню. Метод Гайтлера-Лондона. Метод валентного зв'язку. Порівняння результатів розрахунків  $H_2$  методом Гайтлера-Лондона з експериментом. Валентність.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

## Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

**Завідувач кафедри:** \_\_\_\_\_ **Халатов А. А.** **Екзаменатор:** \_\_\_\_\_ **Пономаренко С. М.**  
(підпис) (прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

**Екзаменаційний білет № 3**

- Складіть детермінанти Слейтера для основного і збудженого станів атома гелію. Як розрізняються хвильові функції синглетного і триплетного станів?
- Які квантово-хімічні методи називаються неемпіричними («*ab initio*»), напівемпіричними? Що означає термін «*ab initio*»?

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(підпис) (прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

**Екзаменаційний білет № 4**

- 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.
- Які квантово-хімічні методи називаються неемпіричними («*ab initio*»), напівемпіричними? Що означає термін «*ab initio*»?

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(підпис) (прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

**Екзаменаційний білет № 5**

1. Порівняйте опис хімічного зв'язку в молекулі  $H_2$  у методах МО і ВС. У якому з них коректно описується процес дисоціації?
2. 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.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(підпись) (прізвище, ініціали) (підпись) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

**Екзаменаційний білет № 6**

1. Які орбіталі називають орбіталями слейтерівського типу?
2. Молекулярні орбіталі для гомоядерних молекул. Двоатомні молекули другого періоду в методі МО ЛКАО.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(підпись) (прізвище, ініціали) (підпись) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

### **Екзаменаційний білет № 7**

1. Приведіть визначення атомної орбіталі. Як позначають атомні орбіталі?
2. Атом гелію. Ортогелій, парагелій. Основи квантово-механічної теорії збурень. Застосування теорії збурень до атома гелія. Основний стан атома гелію.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А.  
(підпис) Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

### **Екзаменаційний білет № 8**

1. Квантовомеханічна багаточасткова проблема в контексті електронної структури багатоелектронного атому.
2. Застосування комп'ютерних програм для квантово-хімічних розрахунків властивостей двоатомних молекул методом Хартрі-Фока. Мінімальний базис.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А.  
(підпис) Екзаменатор: Пономаренко С. М.  
(прізвище, ініціали) (підпис) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

### **Екзаменаційний білет № 9**

1. Поняття про теорію функціоналу електронної густини.
2. Порівняйте опис атома водню в моделі Бора й у квантовій механіці.

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. (підпись) Екзаменатор: Пономаренко С. М. (підпись)  
(прізвище, ініціали) (прізвище, ініціали)

Спеціальність: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Семестр: 10

Навчальний предмет: Квантова хімія

### **Екзаменаційний білет № 10**

1. Атом гелію. Ортогелій, парагелій. Основи квантово-механічної теорії збурень. Застосування теорії збурень до атома гелія. Основний стан атома гелію.
2. Сформулюйте правила заповнення АО електронами (принцип найменшої енергії, принцип Паулі, правило Хунда).

Затверджено на засіданні кафедри фізики енергетичних систем

Протокол №4/2021 від «26» травня 2021 р.

Завідувач кафедри: Халатов А. А. (підпись) Екзаменатор: Пономаренко С. М. (підпись)  
(прізвище, ініціали) (прізвище, ініціали)