

Перелік питань які виносяться на екзамен «Квантова хімія»

1. Порівняйте опис атома водню в моделі Бора й у квантовій механіці.
2. Атомна система одиниць.
3. Приведіть визначення атомної орбіталі. Як позначають атомні орбіталі?
4. Які проблеми при спробі точного опису двоелектронного атому. Як ці проблеми вирішує теорія збурень та варіаційний принцип.
5. Запишіть рівняння нульового і першого порядків для знаходження перших поправок у теорії збурень. Отримайте вираз для першої поправки до енергії.
6. Складіть детермінанти Слейтера для основного і збудженого станів атома гелію. Як розрізняються хвильові функції синглетнош і триплетного станів?
7. Яка послідовність розрахунків за методом самоузгодженого поля? Коли припиняється ітераційна процедура?
8. Сформулюйте правила заповнення АО електронами (принцип найменшої енергії, принцип Паулі, правило Хунда).
9. Метод самоузгодженого поля та його застосування до атома гелію. Рівняння Хартрі та їх виведення з варіаційного принципу.
10. Вигляд рівняння Хартрі-Фока. Основна концепція, яка лежить в їх основі. Шляхи розв'язання. Метод Хартрі-Фока-Рутаана.
11. Що таке адіабатичне наближення? 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.
12. Що таке поверхня потенціальної енергії? Що називають оптимізацією геометрії молекули?
13. Викладіть основні положення методу МО ЛКАО.
14. Що таке базисні набори? Наведіть приклади базисних функцій. Які орбіталі називають орбіталями слейтерівського типу (STO)? Що таке орбіталі гаусівського типу (GTO)?
15. Що означають терміни валентний базис, мінімальний базис, розширений базис.