

Запитання для екзаменаційного контролю знань студентів

з дисципліни «Основи квантової хімії»

1. Принцип невизначеності.
2. Уявлення про хвильову функцію.
3. Оператори. Властивості операторів.
4. Оператори основних фізичних величин.
5. Комутація операторів, узагальнений вираз співвідношення невизначеностей Гейзенберга.
6. Охарактеризувати основні постулати квантової механіки. **Рівняння Шредінгера.**
7. Приклади розв'язування рівняння Шредінгера. Одномірний рух вільної частинки.
8. Розв'язок модельної задачі: рух частинки в одномірній потенціальній ямі.
9. Розв'язок модельної задачі: рух частинки за умови існування одномірного потенціального бар'єру.
10. Розв'язок модельної задачі: лінійний гармонічний осцилятор.
11. Розв'язок модельної задачі: одновимірний жорсткий ротатор.
12. Розв'язок рівняння Шредінгера для атома Гідрогену. Розділення змінних.
13. Кутова функція, розв'язок Φ -рівняння.
14. Кутова частина хвильової функції, розв'язок Θ -рівняння. Поліноми Лежандра.
15. Радіальна частина хвильової функції, розв'язок R -рівняння. Поліноми Лягерра.
16. Класифікація атомних орбіталей.
17. Просторова структура атомних орбіталей.
18. Квантово-механічні пояснення будови атома гідрогену.

19. Загальне уявлення про квантові числа.
20. Енергія атомних орбіталей.
21. Відстань між електроном і ядром.
22. Спектри Гідрогенподібного атома. Серії Лаймана, Бальмера, Хамфрі.
23. Загальна характеристика багатоелектронних атомів. Принцип Паулі.
24. Енергетичні характеристики атома.
25. Головне квантове число. Кутові моменти атома.
26. Орбітальне квантове число.
27. Магнітне квантове число.
28. Спін електрона.
29. Багатоелектронні атоми. Варіативний принцип.
30. Варіативний метод Рітца.
31. Метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока.
32. Визначник Слетера
33. Метод Хартрі.
34. Теорія хімічного зв'язку. Метод МО ЛКАО.
35. Наближення Борна-Оппенгеймера.
36. Метод молекулярних орбіталей (МО).
37. Наближення лінійної комбінації атомних орбіталей (МО ЛКАО).
38. Рівняння Рутаана.
39. Орбіталі Слетера-Зенера.
40. Орбіталі гаусівського типу.
41. Уявлення про електронну кореляцію.
42. Основна концепція методу конфігураційної взаємодії.
43. Теорія збурення.
44. Теорія функціоналу густини.
45. Теорія поверхні потенціальної енергії (ППЕ) системи.
46. Поняття про симетрію молекулярних систем.

