

Вариант 1

1. Как определить среднее значение оператора \hat{H} при волновой функции Ψ , нормированной на единицу?
2. От чего зависит точность неэмпирических квантово-химических расчетов?
3. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы аммиака.
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы HCN (RHF).
5. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 2

1. Что понимают под словами: решить уравнение Шредингера?
2. В чем состоит приближение центрального поля? Зачем оно вводится?
3. Записать уравнение Шредингера для атома He.
4. Что такое узлы атомной радиальной функции? Изобразить графически радиальную функцию 4s.
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $2p_z$ и $3p_z$

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 3

1. Запишите условие стационарности энергии системы.
2. Запишите выражение для волновой функции атома в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
3. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы CH_4 .
4. Записать молекулярную волновую функцию в приближении Борна-Оппенгеймера, пояснить смысл входящих в нее величин.
5. Изобразить графически угловую составляющую атомных орбиталей $2p_y$ и $3p_y$.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 4

1. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.
2. Какими квантовыми числами определяются радиальная функция, угловая функция и нормировочный множитель?
3. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы C_2H_6 .
4. Как найти наиболее вероятное положение электрона на орбитали?
5. Что такое радиальная функция распределения электронов? Как с ее помощью можно найти наиболее вероятное положение электрона на соответствующей орбитали?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 5

1. Как представляют волновую функцию и энергию атома в приближении независимых частиц?
2. Как найти наиболее вероятное положение электрона на орбитали?
3. В чем суть приближения Борна-Оппенгеймера?
4. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы C_2H_4 .
5. Изобразить разрыхляющие МО, образованные двумя s-АО, s- и p-АО.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 6

1. Почему нельзя получить точное решение уравнения Шредингера для систем, содержащих больше одного электрона?
2. Основные свойства радиальных функций.
3. Охарактеризуйте две основные разновидности классификации базисных наборов.
4. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы бензола.
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в TZ базисе?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 7

1. Какие приближения используют для решения уравнения Шредингера для атомов и почему?
2. Что такое узлы атомной радиальной функции? Как сосчитать их число?
3. Что такое поверхность потенциальной энергии? Приведите примеры валентных изомеров.
4. Рассчитайте номер HСМО молекулы CN (RHF).
5. Какие полуэмпирические методы предпочтительны для расчета спектральных характеристик молекул? 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 8

1. о такое волновая функция Хартри? Каким взаимодействием пренебрегают, когда ее записывают?
 2. Какому условию должна удовлетворять радиальная часть волновой функции, чтобы волновая функция на ядре была конечна и непрерывна?
 3. Как качественно и количественно охарактеризовать энергию корреляции электронов?
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы CH_2O (RHF)..
 5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе 6-31 G**?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 9

1. В чем состоит приближение независимых частиц?
 2. Что такое орбиталь? Что такое спин-орбиталь?
 3. Что такое базисный набор Попла? Приведите пример.
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы пиридина (RHF)..
 5. Запишите условие стационарности энергии системы
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 10

1. Чем пренебрегают, решая уравнение Шредингера с волновой функцией Хартри?
 2. Как атомная орбиталь зависит от расстояния вдали от ядра?
 3. Определите, что такое σ - и π -связи. Приведите примеры молекул с этими связями.
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы нафталина (RHF).
 5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисах DZ и 4-31G?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 11

1. В чем суть метода самоогласованного поля? Почему прибегают к приближению ССП?
 2. Что такое сферические гармоники? Почему из них строят линейные комбинации?
 3. Какие вы знаете методы учета корреляционной энергии электронов?
 4. Рассчитайте номер ВЗМО молекулы нафталина (RHF).
 5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3d_{z^2}$ и $4d_{z^2}$.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 12

1. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы?
 2. Как обозначаются орбитали с различными угловыми зависимостями? Различаются ли угловые зависимости орбиталей разных атомов?
 3. Теорема Купманса. Какие характеристики атомов и молекул можно рассчитать с ее помощью?
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы C_2H_2 (RHF).
 5. Что понимают под обозначениями SZ, DZ, TZ?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 13

1. В чем состоит приближение центрального поля? Зачем оно вводится?
 2. Изобразите радиальные составляющие АО 1s, 2s, 3s – типа. Укажите узловые точки и наиболее вероятное положение электрона на соответствующей орбитали.
 3. Рассчитайте номер НСМО молекулы CH_3OH (RHF).
 4. Запишите операторы потенциальной энергии взаимодействия ядер, ядер и электронов, электронов.
 5. Какими квантовыми числами определяется угловая часть атомной орбитали, что она характеризует.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 14

1. Запишите выражение для волновой функции в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
2. Изобразите радиальные составляющие АО 2p, 3p, 4p – типа. Укажите узловые точки и наиболее вероятное положение электрона на соответствующей орбитали.
3. Чем отличаются ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока?
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы призмана (RHF).
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекул HF и F₂ в TZ базисе?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 15

1. Что такое узлы атомной радиальной функции? Как сосчитать их число?
2. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.
3. Нарисовать зависимость слейтеровской и гауссовой базисных функций от расстояния.
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы воды (RHF).
5. Записать молекулярную волновую функцию в приближении Борна-Оппенгеймера, пояснить смысл входящих в нее величин.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 16

1. Какими квантовыми числами определяются радиальная функция, угловая функция и нормировочный множитель?
2. На одном графике изобразите радиальную составляющую 1s АО, ее квадрат и радиальную функцию распределения.
3. Рассчитайте номер НСМО молекулы этилена (RHF).
4. Запишите оператор полной энергии системы M ядер и N электронов. Какой смысл имеют составляющие оператора?
5. Записать уравнение Шредингера для атома. Какие члены входят в атомный гамильтониан?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 17

1. Основные свойства радиальных функций.
2. На одном графике изобразите радиальную составляющую 2p АО, ее квадрат и радиальную функцию распределения.
3. Проанализируйте узловые поверхности 3p АО.
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы ацетилен (RHF).
5. Что такое поверхность потенциальной энергии?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 18

1. Охарактеризуйте две основные разновидности базисных наборов.
2. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.
3. Рассчитайте номер НСМО молекулы BH_3 (RHF).
4. Записать молекулярную волновую функцию в приближении Борна-Оппенгеймера, пояснить смысл входящих в нее величин.
5. Изобразить связывающую и разрыхляющую σ -МО, образованные двумя р-АО

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 19

1. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы?
2. Что такое атомная орбиталь? Дать определение.
3. Две основные разновидности базисных наборов.
4. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$, в базисе STO-3G?
5. На одном графике изобразите радиальную составляющую 2р АО, ее квадрат и радиальную функцию распределения.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 20

1. Основные отличия полуэмпирических методов расчета электронного уравнения Шредингера от неэмпирических.
2. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы NH_3 в минимальном наборе?
3. Как представляют волновую функцию и энергию атома в приближении независимых частиц?
4. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы C_2H_6 в методе MNDO.
5. От чего зависит точность неэмпирических методов расчетов?

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 21

1. Запишите операторы потенциальной энергии взаимодействия ядер, ядер и электронов, электронов.
 2. Что такое волновая функция Хартри? Каким взаимодействием пренебрегают, когда ее записывают?
 3. В чем состоит приближение центрального поля? Зачем оно вводится?
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы C_2H_5OH (RHF).
 5. Записать выражение для атомной спин-орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 22

1. Что такое волновая функция? Требования к волновой функции.
 2. Запишите условие стационарности энергии системы
 3. Рассчитайте номер НСМО молекулы фенола (RHF).
 4. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали $3s$.
 5. Изобразить связывающие МО, образованные двумя s -АО, s - и p -АО.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 23

1. Каков физический смысл выражений $\Psi^*\Psi$ и $\Psi^*\Psi dx$?
 2. Что такое волновая функция Хартри? Каким взаимодействием пренебрегают, когда ее записывают?
 3. Как представляют волновую функцию и энергию атома в приближении независимых частиц?
 4. Сосчитать число узлов радиальной части атомных орбиталей $2s$, $3p$.
 5. Изобразить разрыхляющие МО, образованные 1) двумя s -АО, 2) s - и p -АО.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 24

1. Запишите условие нормировки волновой функции.
2. Почему нельзя получить точное решение уравнения Шредингера для систем, содержащих больше одного электрона?
3. Рассчитайте номер НСМО молекулы толуола (RHF).
4. Написать в общем виде оператор электронной энергии молекулы в приближении Борна-Оппенгеймера
5. Что такое узлы радиальной части атомной орбитали? Как сосчитать их число? 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 25

1. Изложите суть вариационного принципа.
 2. Какие приближения используют при решении уравнения Шредингера для атомов?
 3. Рассчитайте номер НСМО молекулы нитробензола (RHF).
 4. Что такое валентные изомеры? Привести пример.
 5. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали $2s$.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 26

1. Изложите кратко содержание основных постулатов квантовой механики.
 2. В чем состоит приближение независимых частиц?
 3. В чем суть метода самоогласованного поля? Почему прибегают к приближению ССП?
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы пропана (RHF).
 5. Изобразить связывающую и разрыхляющую σ -МО, образованные двумя р-АО.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 27

1. Запишите операторы кинетической энергии: 1) системы M ядер; 2) системы N электронов.
 2. Как представляют волновую функцию и энергию атома в приближении независимых частиц?
 3. Рассчитайте номер НСМО молекулы бутана (RHF).
 4. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали $2s$.
 5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3d_{z^2}$ и $4d_{z^2}$.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 28

1. Какие знаки имеют операторы $T_{\text{я}}(R)$, $T_{\text{э}}(r)$, $V_{\text{яя}}(R)$, $V_{\text{яэ}}(R,r)$, $V_{\text{ээ}}(r)$?
 2. Охарактеризуйте две основные разновидности базисных наборов.
 3. Изобразите схемы перекрывания σ - и π - типа между орбиталями p_1 и p_2 .
 4. Запишите выражение для волновой функции в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
 5. Рассчитайте номер НСМО молекулы фульвена (RHF).
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 29

1. Запишите оператор полной энергии системы M ядер и N электронов. Какой смысл имеют составляющие оператора?
 2. В чем суть метода самосогласованного поля? Почему прибегают к приближению ССП?
 3. Приводит ли интерференция симметричной и антисимметричной (относительно плоскости молекулы) АО к образованию химической связи? Поясните ответ рисунками.
 4. Рассчитайте номер НСМО молекулы бензвалена (RHF).
 5. Изобразить графически угловую составляющую атомных орбиталей $3d_{xy}$ и $4d_{xy}$.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 30

1. Запишите выражение для электронной волновой функции в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
 2. В каких полуэмпирических методах учитывается корреляционная энергия?
 3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы NH_3 методе MNDO?
 4. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы C_2H_6 в неэмпирическом методе ОХФ (RHF).
 5. Напишите выражение для электронной волновой функции атома гелия.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 31

1. Почему в методе Хартри-Фока не учитывается электронная корреляция? В расчетах каких свойств необходим её учет?
2. Что такое атомная орбиталь? Спин-орбиталь?
3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы NH_3 в неэмпирическом методе ОХФ (RHF)?
4. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_3F в базисе 4-21G?
5. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния $\pi(r_x, r_y)$.
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 32

1. Основные методы учета электронной корреляции.
2. Какие полуэмпирические методы предпочтительны для расчета
а) теплот образования; б) водородных связей?
3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_3F в базисе DZ?
4. Приближение независимых частиц. Записать выражение для атомной орбитали атома He.
5. Изобразите радиальные составляющие АО 2p, 3p, 4p – типа.
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 33

1. Что такое атомная орбиталь? Записать выражение для атомной орбитали атома H.
2. Как качественно и количественно охарактеризовать энергию корреляции?
3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_3F в базисе 6-31G*?
4. Изобразите радиальную составляющую АО 3p – типа.
5. Что такое узлы атомной угловой функции? Как сосчитать их число?
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 34

1. Приближение Борна-Оппенгеймера. Предположения, лежащие в его основе.
2. В каких полуэмпирических методах учитывается корреляционная энергия? и неэмпирическом методе ОХФ (RHF).
3. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы BH_3 в методе MNDO.
4. Изобразите радиальную составляющую АО 4p – типа.
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3d_{z^2}$.
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 35

1. Полуэмпирическая квантовая химия. Достоинства и недостатки.
2. Метод Хартри-Фока для молекул.
3. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы NH_3 в методе MNDO.
4. Что такое узлы радиальной функции? Как сосчитать их число?
5. Изобразите угловую составляющую АО $2p$ – типа.
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 36

1. Метод молекулярных орбиталей.
2. Структурная жесткость молекул.
3. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы NH_3 в неэмпирическом методе ОХФ (RHF).
4. Изобразите угловую составляющую АО $3p$ – типа.
5. Что понимают под обозначениями SZ, DZ, TZ?
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 37

1. В чем состоит приближение центрального поля? Зачем оно вводится?
2. Охарактеризуйте основные разновидности базисных наборов.
3. Изобразите схемы перекрывания σ - и π - типа между орбиталями p_1 и p_2 .
4. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $4d_{z^2}$.
5. Рассчитайте номер НСМО молекулы H_2O_2 (RHF).
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 38

1. В чем суть метода самосогласованного поля? Почему прибегают к приближению ССП?
2. Как атомная орбиталь зависит от расстояния вдали от ядра?
3. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе 6-31 G*?
4. Что такое узлы атомной радиальной функции? Как сосчитать их число?
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3p_z$ (5 б.)
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 39

1. Детерминант Слейтера для атома He.
2. Как атомная орбиталь зависит от расстояния вблизи от ядра?
3. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе 6-31 +G*?
4. Что такое узлы атомной угловой функции? Как сосчитать их число?
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3p_z$
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5
вопрос – 5 б.

Вариант 40

1. Детерминант Слейтера для молекулы.
2. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы?
3. Какие вы знаете методы учета корреляционной энергии электронов?
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы воды.
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе 4-31G?
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5
вопрос – 5 б.

Вариант 41

1. Какие параметры молекулы необходимо задать при решении электронного уравнения Шредингера?
2. В чем состоит приближение независимых частиц? Запишите выражение для многоэлектронной волновой функции в этом приближении.
3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CF_3H в базисном наборе DZ?
4. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы NCH в методе MNDO.
5. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния для связи типа $\sigma(s, p_x)$.
1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5
вопрос – 5 б.

Вариант 42

1. Запишите операторы потенциальной энергии взаимодействия ядер, ядер и электронов, электронов.
 2. Какие приближения используют для решения уравнения Шредингера для атома?
 3. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния для связи типа $\sigma(p_x, p_x)$.
 4. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы HCN в методе ОХФ (RHF).
 5. Какими квантовыми числами определяются радиальная функция, угловая функция и нормировочный множитель?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 43

1. Запишите гамильтониан двухатомной молекулы.
 2. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе TZ
 3. От чего зависит точность неэмпирических методов расчетов?
 4. Рассчитайте номер ВЗМО молекулы нафталина (RHF).
 5. Как зависит атомная орбиталь от расстояния вдали от ядра?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 44

1. Что такое волновая функция Хартри? Каким взаимодействием пренебрегают, когда ее записывают?
 2. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_2F_2 в базисе 6-31G*.
 3. Что такое валентные изомеры и конформеры? Привести примеры.
 4. Метод МО Хюккеля.
 5. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния для связи типа $\sigma(p_x, p_x)$.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 45

1. Запишите выражение для волновой функции Хартри для атома гелия в приближении независимых частиц.
 2. π -электронное приближение. Его физическое обоснование.
 3. В каких полуэмпирических методах учитывается корреляционная энергия?
 4. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы H_2O_2 в методе MNDO.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 46

1. Запишите выражение для электронной волновой функции в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
 2. Приближение Борна-Оппенгеймера. Предположения, лежащие в его основе.
 3. Рассчитайте номер нижней свободной (вакантной) МО молекулы H_2O_2 в неэмпирическом методе ОХФ (RHF).
 4. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния $\sigma(s, r_x)$.
 5. Какими квантовыми числами определяются радиальная функция, угловая функция и нормировочный множитель?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 47

1. Основные достоинства и недостатки полуэмпирических методов.
 2. Что такое радиальная функция распределения? Как найти наиболее вероятное положение электрона, описываемого соответствующей орбиталью?
 3. Рассчитайте номер НСМО молекулы пропана (RHF).
 4. Приведите зависимость интеграла перекрывания S_{ij} от межъядерного расстояния $\pi(r_z, r_z)$.
 5. Что такое узлы угловой части атомной орбитали? Как сосчитать их число?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 48

1. Что такое поверхность потенциальной энергии? Как её получают? Как определяют особые точки на ППЭ?
2. Записать приближение МО ЛКАО, пояснить смысл входящих в него величин.
3. Классификации базисных наборов.
4. Рассчитайте номер НСМО молекулы пропена (RHF).
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $3d_{xy}$ и $4d_{xy}$.

4d_{xy}.

1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 49

1. Приближение ССП.
 2. От чего зависит точность неэмпирических методов расчетов?
 3. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали $2p_z$ и $3p_z$.
 4. Что такое радиальная функция распределения? Как найти наиболее вероятное положение электрона, описываемого соответствующей орбиталью?
 5. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы воды.
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.

Вариант 50

1. Записать уравнение Шредингера для атома. Какие приближения используют для решения уравнения Шредингера для атома?
 2. Рассчитайте номер НСМО молекулы озона (RHF).
 3. Сколько базисных функций используется при расчете молекулы CH_4 в базисном наборе 6-31G**?
 4. Размерность детерминанта Слейтера для молекулы воды.
 5. Что такое узлы атомной радиальной функции? Как сосчитать их число?
- 1 вопрос – 10 б.; 2 вопрос – 10 б.; 3 вопрос – 10 б.; 4 вопрос – 5 б.; 5 вопрос – 5 б.