

### Вариант 1-1

1. Что такое волновая функция? Требования к волновой функции.
2. Запишите условие стационарности энергии системы
3. В чем состоит приближение независимых частиц?
4. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали 3s.
5. Изобразить связывающие МО, образованные двумя s-АО, s- и p-АО.

### Вариант 1-2

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.

### Вариант 1-3

1. Запишите условие нормировки волновой функции.
2. Почему нельзя получить точное решение уравнения Шредингера для систем, содержащих больше одного электрона?
3. Что такое волновая функция Хартри? Каким взаимодействием пренебрегают, когда ее записывают?
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?

### Вариант 1-4

1. Изложите суть вариационного принципа.
2. Какие приближения используют при решении уравнения Шредингера для атомов?
3. В каких полуэмпирических методах учитывается факт корреляции электронов?
4. Что такое валентные изомеры? Привести пример.
5. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали 2s.

### Вариант 1-5

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. Что такое базисный набор Попла? Приведите пример.
5. Изобразить связывающую и разрыхляющую  $\sigma$ -МО, образованные двумя p-АО.

### Вариант 1-6

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. Что такое базисный набор Попла? Приведите пример.
4. Изобразить графически радиальную составляющую атомной орбитали 2s.
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали  $3d_z^2$  и  $4d_z^2$ .

### Вариант 1-7

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. Указать условия, при которых образуются связывающие и антисвязывающие молекулярные орбитали. Привести примеры.
5. Записать выражение для атомной спин-орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.

#### Вариант 1-8

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  $\sigma$ - и  $\pi$ - 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. Какими квантовыми числами определяется угловая часть атомной орбитали, что она характеризует.

#### Вариант 1-9

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. Какими квантовыми числами определяются радиальная функция, угловая функция и нормировочный множитель?
5. Изобразить графически угловую составляющую атомных орбиталей  $3d_{xy}$  и  $4d_{xy}$ .

#### Вариант 1-10

1. Как определить среднее значение оператора  $\hat{H}$  при волновой функции  $\Psi$ , нормированной на единицу?
2. От чего зависит точность неэмпирических квантово-химических расчетов?
3. Является ли условие одинаковой симметрии взаимодействующих АО необходимым для образования химической связи? Поясните ответ рисунками.
4. Основные свойства радиальных функций.
5. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.

#### Вариант 1-11

1. Что понимают под словами: решить уравнение Шредингера?
2. В чем состоит приближение центрального поля? Зачем оно вводится?
3. Записать уравнение Шредингера для атома. Какие члены входят в атомный гамильтониан?
4. Что такое узлы атомной радиальной функции? Как сосчитать их число?
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали  $2p_z$  и  $3p_z$

#### Вариант 1-12

1. Запишите условие стационарности энергии системы.
2. Запишите выражение для волновой функции атома в приближении центрального поля. Поясните смысл входящих в него величин.
3. Что такое орбиталь? Что такое спин-орбиталь?

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  $3p_z$ .

#### Вариант 1-13

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. Какова роль фаз атомных орбиталей при образовании МО.
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?

#### Вариант 1-14

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. Что такое молекулярная орбиталь? Записать выражение для молекулярной орбитали в приближении МО ЛКАО.
5. Изобразить разрыхляющие МО, образованные двумя s-АО, s- и p-АО.

#### Вариант 1-15

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. Записать волновую функцию в приближении МО ЛКАО.
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы  $\text{CH}_2\text{F}_2$  в TZ базисе?

#### Вариант 1-16

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. Как атомная орбиталь зависит от расстояния вдали от ядра?
5. Какие полуэмпирические методы предпочтительны для расчета спектральных характеристик молекул?

#### Вариант 1-17

1. Что 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. Запишите условие нормировки волновой функции.
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы  $\text{CH}_2\text{F}_2$  в базисе 6-31 G\*\*?

### Вариант 1-18

1. В чем состоит приближение независимых частиц?
2. Что такое орбиталь? Что такое спин-орбиталь?
3. Что такое базисный набор Попла? Приведите пример.
4. Что такое конформация молекул? Привести примеры.
5. Запишите условие стационарности энергии системы

### Вариант 1-19

1. Чем пренебрегают, решая уравнение Шредингера с волновой функцией Хартри?
2. Как атомная орбиталь зависит от расстояния вдали от ядра?
3. Определите, что такое  $\sigma$  - и  $\pi$  -связи. Приведите примеры молекул с этими связями.
4. Изложите суть вариационного принципа.
5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекулы  $\text{CH}_2\text{F}_2$  в базисах DZ и 4-31G?

### Вариант 1-20

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. Изложите кратко содержание основных постулатов квантовой механики.
5. Изобразить графически угловую составляющую атомной орбитали  $3d_{z^2}$  и  $4d_{z^2}$ .

### Вариант 1-21

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. Запишите операторы кинетической энергии: 1) системы M ядер; 2) системы N электронов.
5. Что понимают под обозначениями SZ, DZ, TZ?

### Вариант 1-22

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. Охарактеризуйте применение теории возмущений. В чем преимущества и недостатки такого подхода?
4. Запишите операторы потенциальной энергии взаимодействия ядер, ядер и электронов, электронов.
5. Какими квантовыми числами определяется угловая часть атомной орбитали, что она характеризует.

### Вариант 1-23

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. Какие знаки имеют операторы  $T_{\text{я}}(R)$ ,  $T_{\text{э}}(r)$ ,  $V_{\text{яя}}(R)$ ,  $V_{\text{яэ}}(R, r)$ ,  $V_{\text{ээ}}(r)$  и почему?

5. Сколько и каких базисных функций используется при расчете молекул HF и F<sub>2</sub> в TZ базисе?

#### Вариант 1-24

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. Что понимают под словами: решить уравнение Шредингера?
5. Записать молекулярную волновую функцию в приближении Борна-Оппенгеймера, пояснить смысл входящих в нее величин.

#### Вариант 1-25

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. Что такое сферические гармоники? Когда используют их линейные комбинации?
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?

#### Вариант 1-26

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. Как определить среднее значение оператора H при волновой функции  $\Psi$ , нормированной на единицу?
5. Что такое поверхность потенциальной энергии?

#### Вариант 1-27

1. Охарактеризуйте две основные разновидности базисных наборов.
2. Записать выражение для атомной орбитали. Пояснить смысл входящих в него величин.
3. Что понимают под словами: решить уравнение Шредингера?
4. Записать молекулярную волновую функцию в приближении Борна-Оппенгеймера, пояснить смысл входящих в нее величин.
5. Изобразить связывающую и разрыхляющую  $\sigma$ -МО, образованные двумя p-АО

#### Вариант 1-28

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 C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NH<sub>2</sub>, в базисе STO-3G?
5. На одном графике изобразите радиальную составляющую 2p АО, ее квадрат и радиальную функцию распределения.