**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД**

**«ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»**

**МІНІСТЕРСТВА ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**Кафедра хімії**

**«*Квантова хімія*»**

**Перелік питань до екзамену**

**Освітньо-кваліфікаційний рівень:** бакалавр

**Галузь знань:**0401 «Природничі науки»

**Напрям підготовки:** 6.040101 «Хімія»

**Статус курсу:** нормативна дисципліна

**Теоретичні питання**

1. Основні поняття і постулати квантової мехаіки.
2. Принцип тотожних частинок, які неможливо розлічити.
3. Принцип Паулі.
4. Квантова систематика атомного стану на прикладі водневоподібного атома.
5. Розподілення електронів в атомі по станам.
6. Варіаційний принцип і рішення рівняння Шредінгера.
7. Наближення незалежних частинок.
8. Метод самоузгодженого поля.
9. Наближення центрального поля.
10. Атомні орбіталі та їх характеристики.
11. Антисиметричність електронної хвильової функції.
12. Детермінанти Слейтера.
13. Метод Хартрі-Фока.
14. Обмежений та необмежений методи Хартрі-Фока.
15. Квантово-хімічне трактування рішень Хартрі-Фока.
16. Електронні конфігурації атомів з точки зору квантової хімії.
17. Теорія молекулярного зв’язку. Адіабатичне наближення Борна-Оппенгеймера.
18. Метод Хартрі-Фока для молекули.
19. Наближення МО ЛКАО. Рівняння Рутана.
20. Обмеження методу Хартрі-Фока. Електронна кореляція.
21. Метод конфігураційної взаємодії.
22. Теорема Брілюена.
23. Теорія збуджень.
24. Два методи теорії будови молекул. Основні положення і недоліки теорії валентного зв’язку.
25. Розрахунок енергії дисоціації хімічного зв’язку.
26. Точність квантово-хімічних розрахунків хімічних властивостей молекул.
27. Основні положення методу молекулярних орбіталей.
28. Молекула Н2+ в методі МО ЛКАО.
29. Характеристики молекулярних орбіталей. Утворення σ- та π-молекулярних орбіталей.
30. Характеристики молекулярних орбіталей. Молекулярні терми.
31. Молекулярні орбіталі та їх симетрійна класифікація.
32. Полярний зв'язок. Електричний дипольний момент молекули.
33. Іонно-ковалентний зв'язок. Ступінь полярності хімічного зв’язку.
34. Енергетичний аспект опису хімічного зв’язку. Теорема Віріала.
35. Локалізація і гібридизація орбіталей.
36. Будова багатоатомних молекул.
37. Міжмолекулярна взаємодія.
38. Специфіка опису хімічного зв’язку у координаційних сполуках.
39. Теорія кристалічного поля.
40. Теорія поля лігандів.
41. Комплекси сильного та слабого полей. Магнітні властивості комплексів.
42. Ефект Яма-Теллеру.
43. Методи розрахунку енергії міжмолекулярної взаємодії.
44. Возневий зв'язок.
45. Квантово-хімічний опис хімічних реакцій у газовій фазі. Зв'язок хімічной термодинаміки і хімічної кінетики.
46. Поверхня потенційної енергії (ППЕ) хімічної реакції.
47. Правило Вудворда-Хоффмана та його використання для оцінки реакційної здатності органічних сполук.
48. Методи опису хімічних реакцій. Теорія збуджень, метод координати реакції, метод граничних молекулярних орбіталей функції.
49. Молекулярна спектроскопія енергетичного стану ізольованих молекул.
50. Обертальний стан молекул. Типи молекулярних вовчків.
51. Коливальний стан молекул.
52. Коливально-обертальні спектри.
53. Комбінаційне розсіювання (КР) світла.
54. Коливання багатоатомних молекул.
55. Характеристичні коливання.
56. Електронні спектри.
57. Електронний парамагнітний резонанс.
58. Ядерний магнітний резонанс.
59. Мессбауерівська спектроскопія.
60. Дифракційні методи визначення структури кристалів.