

ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДО ЗАЛІКУ ІЗ СПЕЦІАЛЬНОГО КУРСУ „МЕТОДИ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ”

ТЕОРЕТИЧНІ ПИТАННЯ

1. Принцип тотожності частинок у квантовій механіці. Хвильові функції бозонів та ферміонів.
2. Основний стан атома гелію в першому наближенні теорії збурень. Кулонів інтеграл.
3. Основний стан атома гелію: варіаційний підхід. Кулонів інтеграл.
4. Збуджений стан атома гелію у першому наближенні теорії збурень. Обмінний інтеграл.
5. Загальна схема методу Хартрі-Фока для атомів. Обмежений і необмежений методи ХФ.
6. Пост Хартрі-Фокові наближення: кореляційна взаємодія та методи її розрахунку.
7. Адіабатичне наближення на прикладі молекули водню.
8. Загальна схема адіабатичного наближення. Багаточастинковий потенціал взаємодії атомів. Залежність від кутів.
9. Метод Томаса-Фермі. Автомодельний та наближений розв'язки при малих відстанях від ядра.
10. Теорема Хоенберга – Кона та рівняння Кона – Шема. Метод розв'язку рівняння ТФГ.
11. Обмінно-кореляційна взаємодія в ТФГ та представлення відповідного функціоналу. Наближення локальної густини.
12. Атомні орбіталі і їх характеристики. Слетерові і гаусові орбіталі. Мінімальний базисний набір. Розширені базисні набори.
13. Молекулярні орбіталі і їх характеристики. МОЛКАО. Поляризаційні і Ридбергові функції.
14. Інтеграл перекривання та багатоцентрові інтегралі. Наближені методи їх розрахунку.

ПИТАННЯ ДО МЕТОДІВ

1. Опції та установки методу розрахунку Molecular Mechanics Force Fields
2. Опції та установки методу розрахунку Semi-empirical.
3. Опції та установки методу розрахунку ab initio.
4. Опції та установки методу розрахунку Density Functional.
5. Наближення CNDO та його особливості і область застосування.
6. Наближення NDO та його особливості і область застосування.
7. Наближення CINDO та його особливості і область застосування.
8. Наближення MINDO та його особливості і область застосування.
9. Наближення ZINDO та його особливості і область застосування.
10. Опції та установки для розрахунку Single Point.
11. Опції та установки для розрахунку Geometry optimization.

12. Опції та установки для розрахунку Molecular Dynamics.
13. Опції та установки для розрахунку Vibrations.
14. Опції та установки для розрахунку Monte Carlo.

ЗАВДАННЯ ДЛЯ ПРАКТИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

1. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули C_{20} .
2. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули C_{20} .
3. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули C_{60} .
4. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули C_{60} .
5. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули нафталіну.
6. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули нафталіну.
7. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули аспіріну.
8. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули аспіріну.
9. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули води.
10. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули води.
11. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули бензолу.
12. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули бензолу.
13. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати коливальні моди для молекули етану.
14. Розрахувати енергетичний спектр і побудувати електронні орбіталі та електронну густину для молекули етану.