

## Вопросы итогового контроля по предмету "Электрохимия"

1. Введение. Основные принципы и развитие квантовой механики.
2. Теории Планка и Эйнштейна.
3. Модели атома Резерфорда и Бора. Опыты де Бройля.
4. Волновая механика Шредингера и матричная механика Гейзенберга.
5. Математический аппарат квантовой механики.
6. Основные постулаты квантовой механики.
7. Простейшие задачи квантовой механики.
8. Вероятность распространения частиц в пространстве, волновые функции. Операторы физических величин в квантовой механике.
9. Частные функции и частные значения операторов.
10. Операторы координаты, импульса, углового момента, кинетической и потенциальной энергии.
11. Оператор Гамильтона. Средние значения наблюдаемых величин.
12. Стационарное уравнение Шредингера.
13. Простейшие задачи квантовой механики.
14. АТОМ ВОДОРОДА. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ. Основные сведения о строении атома.
15. Общие принципы описания многоэлектронных атомов в квантовой механике.
16. Электронная конфигурация.
17. Многоэлектронные атомы. Теория полуэмпирического спина. Атом гелия.
18. Принцип Паули и принцип наименьшей энергии.
19. Электронная конфигурация. Спин. Операторы спина.
20. Синглетное и триплетное состояния двухэлектронных систем.
21. Термы электронных атомов. Электронная конфигурация. Термы. Структура терминов.
22. Спино-орбитальное взаимодействие. LS-связи. Правило Гунда.
23. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашана-Бака.
24. Основные сведения о строении атома. Задача об атоме водорода.
25. Выделение переменных. Дискретный спектр.
26. Общие принципы описания многоэлектронных атомов в квантовой механике.
27. Электронная конфигурация. Терма.
28. Атом водорода. Задача об атоме водорода.
29. Качественная характеристика радиальной и угловой частей волновой функции.
30. s-, p- и d-функции атома водорода.
31. Вариационный принцип и вариационный метод квантовой механики.
32. Метод Ритца.
33. Двухатомные молекулы.

34. Молекулярные орбитали - метод линейной комбинации локализованных атомных орбиталей (МО АОЧК).
35. Систематика термов двухатомных молекул.
36. Молекулярные термины, возникающие из сближения двух атомов.
37. Метод Гейтлера-Лондона (метод валентных схем - метод валентных связей (ВС), причина образования химической связи).
38. Метод молекулярных орбиталей.
39. Нахождение основного названия двухатомных молекул, молекулы кислорода.
40. Диаграмма корреляции. Виды связей ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ). Сравнение методов МО и ВБ.
41. Направление связей, гибридизация, гибридные атомные и молекулярные орбитали, виды гибридизации.  
Виды связей: ионная, ковалентная, полярная, донорно-акцепторная.
43. Развитие понятия химической связи.
44. Многоатомные молекулы. Симметрия молекулярных орбиталей.
45. Теория групп, точечные группы.
46. Применение теории групп для нахождения МО. Длинные одномерные  $\pi$ -системы.
47. Молекулярные орбитали конъюгированных систем.
48. Линейные и циклические  $\pi$ -системы.
49. Энергия и тип молекулярных орбиталей. Правило  $4n+2$ . устойчивость  $\pi$ -углеводородов, реакционная способность радикалов.
50. Квантово-химические свойства некоторых типов реакций.
51. Ориентация, реакционная способность в реакциях нуклеофильного, радикального и электрофильного замещения в ароматическом кольце с различными группами замещения.
52. Правила Вудворда-Гоффмана для синхронных реакций.
53. Электроциклические реакции, сигматропные реакции.
54. Методы расчета квантовой химии.
55. Возможности использования расчетных результатов квантовой механики в статистической термодинамике.
56. Теория элементарного акта химических превращений, молекулярная спектроскопия и другие разделы химии.
57. Основные этапы развития квантовой теории.  
Квантовая химия как основа современной химической науки.
59. Излучение черного тела.
60. Неудача классической механики.
61. Опыт Марсдена и теория Резерфорда.
62. Постулаты квантовой механики.
63. Оператор физических величин в квантовой механике.
64. Оператор Гамильтона.
65. Уравнение Шредингера.
66. Основные вопросы квантовой механики.
67. Понятие о туннельном эффекте.

68. Модель свободного электрона.
69. Теория Гильберта.
70. Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов.
71. Атомные орбитали.  
Квантовые числа и их физический смысл. Теория момента импульса.
73.  $S_{\text{pin}}$ : операторы, величины, функции. Спин-орбитальное взаимодействие.
74. Многоэлектронные атомы.
75. Квантовые числа для многоэлектронных атомов.
76. Термы многоэлектронных атомов.
77. Правило Гунда.
78. Орбиты и правила Слейтера-Зенера.
79. Переходы под действием электромагнитного излучения.
80. Правило отбора, коэффициент Эйнштейна. Действие внешнего поля.
81. Эффекты Штарка, Зеемана и Пашена-Бака.
82. Молекулярное уравнение Шредингера.
83. Адиабатическое приближение.
84. Волновое уравнение электрона. Электронная плотность и ее изменение при образовании химической связи.
85. Методы Хартри и Хартри-Фока.  
Уравнение Хартри-Фока.
87. Вид локализованных молекулярных орбиталей методом линейной комбинации атомных орбиталей Базовые функции Слейтера и Гаусса.
88. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии и положению.
89. Вычисление двухатомных молекул.
90. Корреляционные диаграммы двухатомных молекул.
91. Гомо-и гетероядерные молекулы двухатомных молекулярных орбиталей. ( $\text{He}_2$ ,  $\text{Li}_2$ ,  $\text{Be}_2$ ,  $\text{B}_2$ ,  $\text{S}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{F}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{LiF}$ ).
92. Молекулярные орбитали многоатомных молекул ( $\text{BeH}_2$ ,  $\text{BH}_3$ ,  $\text{BF}_3$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{NO}_2$ ).
93. Эквивалентные орбитали и орбитали симметрии. гибридизация s-, p-, d-типа.
94. Классические теории о локализованных молекулярных орбиталях и химическом строении.
95. Квантово-химическая характеристика химических реакций.
96. Переходное состояние на поверхности потенциальной энергии, индекс реакционной способности.
97. Виды химических реакций.
98. Термические и фотохимические реакции.
99. Орбитальная симметрия. Принцип Вудворда-Хоффмана, применение.
100. Современные вычислительные методы квантовой химии. Молекулярная спектроскопия.