

## КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ПО КВАНТОВОЙ ХИМИИ

1. Квантовая химия — основа теоретической химии.
2. Возникновение квантовой концепции.
3. Идея Планка и квантовая теория Эйнштейна.
4. Квантование электромагнитного излучения.
5. Фотоэлектрический эффект и его законы.
6. Эффект Комптона.
7. Дуалистическая природа микрочастиц.
8. Эксперименты Франка и Герца, дискретность энергетических уровней в атомных системах.
9. Эксперименты Резерфорда. Эксперименты Штерна и Герлаха.
10. Рентгеновские лучи и их природа.
11. Излучение абсолютно чёрных тел.
12. Квантовая теория.
13. Явление светоиндуцированной интерференции.
14. Дифракция. Светоиндуцированная дифракция.
15. Дуалистическая природа света. Эксперименты Дэвисона-Гермера и дифракция микрочастиц.
16. Радиоактивное излучение и его природа. Радиоактивный распад.
17. Теория Бора.
18. Эксперимент Дэвисона и Гермера.
19. Эксперименты Штерна и Герлаха. Спин электрона.
20. Дуалистическая природа микрочастиц.
21. Катодные лучи. Открытие электрона.
22. Электроотрицательность и потенциал ионизации.
23. Валентная теория.
24. Импульс. Угловой момент, кинетическая и потенциальная энергии.
25. Соотношения неопределенности Гейзенберга.
26. Ультрафиолетовая катастрофа.
27. Катодные лучи. Открытие электрона.
28. Квантовые числа.
29. Принцип Паули. Принцип суперпозиции состояний.
30. Уравнение Шрёдингера для атома гелия.
31. Применение уравнения Шрёдингера к движению электрона в многомерном потенциальном слое.
32. Квантово-механическая теория ковалентной связи. На примере молекулы водорода.
33. Электроотрицательность и потенциал ионизации.
34. Уравнение Шрёдингера для атома гелия.
35. Определение свойств молекулы методом молекулярных орбиталей.
36. Разделение переменных. Водородоподобные орбитали.
37. Математический аппарат квантовой механики. Свойства операторов.
38. Уравнение Шрёдингера. Происхождение уравнения Шрёдингера.

39. Применение уравнения Шрёдингера к движению электрона в одномерном потенциальном слое.
40. Принцип Паули. Правило Гунда. Принцип суперпозиции состояний.
41. Определение свойств молекулы методом молекулярных орбиталей.
42. Спин элементарной частицы и его связь с магнитным моментом.
43. Оператор спина и коммутационное соотношение.
44. Эксперименты Уленбека и Годсмита и спин электрона.
45. Фермионы и бозоны. Классификация фундаментальных частиц.
46. Постулаты квантовой механики.
47. Вариационный принцип и вариационный метод в квантовой механике. Метод Риттса.
48. Связь между квантовой механикой и классической физикой.
49. Квантово-механическая теория ковалентной связи.
50. Расчет кулоновского интеграла.
51. Электронная конфигурация и атомный терм.
52. Методы расчета пространственной и электронной структуры молекул
53. Неэмпирические и эмпирические методы расчета пространственной и электронной структуры молекул
54. Методы расчета пространственной и электронной структуры молекул на основе компьютерных обучающих материалов
55. Энергии симметричных и антисимметричных функций.
56. Определение свойств молекул методом молекулярных орбиталей.
57. Образование молекулярных орбиталей из атомных орбиталей.
58. Пределы применения квантовой механики.
59. Уравнение Шрёдингера. Происхождение уравнения Шрёдингера.
60. Математический аппарат квантовой механики.
61. Определение неизвестного коэффициента вариационным методом.
62. Метод нулевого приближения.
63. Индекс свободной валентности.
64. Квантово-механическая теория ковалентной связи.
65. Области применения уравнения Шрёдингера. Применение к движению.
66. Принцип Паули. Принцип суперпозиции состояний.
67. Свойства операторов.
68. Квантово-механическая теория ковалентной связи.
69. Область Планка.
70. Определение молекулярных свойств с помощью метода молекулярных орбиталей.
71. Методы расчета пространственной и электронной структуры молекул.
72. Метод функционала плотности. Методы нулевого дифференциального покрытия.