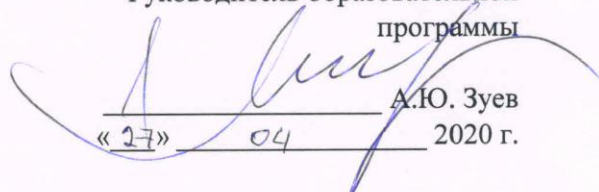


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ  
Руководитель образовательной  
программы



А.Ю. Зув  
« 27 » 04 2020 г.

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**  
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине  
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ  
в составе модуля  
Современные теоретические основы химии материалов

Уровень образования: Магистратура

Форма обучения: Очная

## Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Конфигурация молекулы, ее предсказание на основании теории гибридизации и отталкивания электронных пар.
2. Конформация молекулы. Внутреннее вращение, потенциальный барьер перехода между конформациями.
3. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии.
4. Представление операций симметрии. Характеристики представлений, таблицы характеров.
5. Колебания сложных молекул. Анализ нормальных колебаний с помощью таблицы характеров.
6. Методы наблюдения колебаний молекул – инфракрасная спектроскопия и комбинационное рассеяние света.
7. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей. Использование теории симметрии для определения вида МО.
8. Правила отбора в электронных спектрах поглощения. Полная волновая функция электронной конфигурации молекулы, ее симметрия.
9. Электронное строение сложных молекул. Варианты расчетной реализации метода Рутаана.
10. Электронные конфигурации молекул, конфигурационное взаимодействие.
11. Методы нулевого дифференциального перекрывания, полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием, их связь с методом Рутаана.
12. Семейство методов CNDO, их вычислительные особенности и возможности.
13. Расчетные полуэмпирические методы М.Дьюара: MINDO/3, MNDO, PM3.
14. Метод молекулярной механики, его основные особенности. Оптимизация геометрической структуры молекул в методе молекулярной механики.
15. Квантово-химическое описание химических реакций. Поверхность потенциальной энергии.
16. Использование классических траекторий на поверхности потенциальной энергии. Переходное состояние.
17. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях. Правила Вудворда-Хоффмана.
18. Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Применение метода возмущений для описания межмолекулярных взаимодействий.
19. Дисперсионные, индукционные и ориентационные взаимодействия. Силы Ван-дер-Ваальса.

20. Специфические межмолекулярные взаимодействия. Понятие электроно-донорноакцепторного взаимодействия. Водородная связь, ее специфические особенности.
21. Общая характеристика континуальных подходов к описанию межмолекулярных взаимодействий.
22. Статистические методы описания межмолекулярных взаимодействий на примере метода COSMO.