

Приклади семінарських завдань

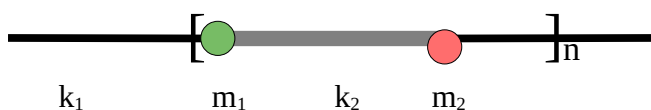
Тема 1.

Наведіть дві різні конфігурації еквівалентних електронів, що можуть відповідати терму Расела-Саундерса 5F_2 . Чи можливий електричний квадрупольний перехід з цього терму в терм 1F_3 ?

Тема 2.

Знайдіть сталу ангармонізму двохатомної молекули, яка в ІЧ спектрі поглинання має два обертони $\omega_1=5200\text{ см}^{-1}$ і $\omega_2=7650\text{ см}^{-1}$. Яка енергія дисоціації цієї молекули?

Полімер, що зображений на рисунку, має силові сталі зв'язків $k_1=1$, $k_2=2$. Відносні маси атомів становлять $m_1=2$, $m_2=3$. Визначте, чи є він стабільним відносно малих валентних коливань в гармонійному наближенні.



Тема 3.

Побудуйте діаграму МО для іона N_2^- та охарактеризуйте його стабільність.

Тема 4.

В наближенні МО ЛКАО розрахуйте порядок зв'язку та електронну густину на атомах в молекулярному іоні HHe^+ .

Тема 5.

Доведіть, що в рамках невиродженої теорії збурень друга поправка до енергії основного стану завжди негативна. Покажіть, чому нетривіальне збурення завжди знімає виродження рівнів на прикладі двократно виродженого рівня.

Розгляньте результати розрахунку енергетичних рівнів атомів Li, Be, B методом повної конфігураційної взаємодії. Які конфігурації домінують в їхньому основному стані?

Тема 6.

Розгляньте результати розрахунку енергетичних рівнів атомів Ca, Sc, Ti методами Гартрі-Фока та повної конфігураційної взаємодії. Чи виконується правило Маделунга для основного стану цих атомів? Чи можна, використовуючи інформацію про основний стан цих атомів, розмістити їх в періодичній таблиці?

Розрахуйте методом Гартрі-Фока та порівняйте енергію зв'язку молекул HF, HCl та HBr. Яка з цих кислот є найсильнішою?

Тема 7.

Використовуючи простий метод Хюккеля, покажіть, чи є стабільним іон $C_8H_8^{2-}$. Чи є він ароматичним, антиароматичним чи неароматичним?

Чому правило Хюккеля не є застосовним для молекули нафталену?

Тема 8.

Чи може врахування малого міжелектронного відштовхування в рамках розширеної моделі Хаббарда підвищити стабільність молекули циклобутадієну? Використовуйте теорію збурень першого та другого порядку.

КВАНТОВА ХІМІЯ

Модуль I. Основи квантової механіки молекул

Контрольна робота

Варіант №99

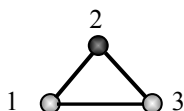
1. Наведіть два терми, до яких в наближенні L-S зв'язку можливий електричний дипольний перехід з терму 1F_3 . (5 балів)
2. Наведіть дві конфігурації еквівалентних електронів, що можуть відповідати терму Расела-Саундерса 5H_5 . (7 балів)
3. Двохатомна полярна молекула має перший обертон з хвильовим числом 5100 см^{-1} і енергію дисоціації 9 е.В. Знайдіть хвильове число основного коливального переходу. (8 балів)

Модуль II. Основні методи квантової хімії

Контрольна робота

Варіант №99

1. Охарактеризуйте метод повної конфігураційної взаємодії. Чим визначається його точність? Чи є він розмірно-узгодженим? (5б)
2. Які основні положення методу Хартрі-Фока? Які недоліки має цей метод? Що таке електронна кореляція? (5б)
3. Використовуючи простий метод Хюкеля, розрахуйте значення енергії та абсолютного значення дипольного моменту в основному стані молекули, що зображена на рисунку, якщо довжини усіх зв'язків однакові і дорівнюють a . (10б)



$$\beta_{1,2} = \beta_{1,3} = -1/3, \beta_{2,3} = -2/3, \alpha_1 = \alpha_3 = 2/3, \alpha_2 = -2$$