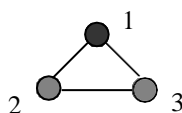


## Харківський національний університет ім. В.Н.Каразіна

Факультет хімічний  
Спеціальність хімія  
Спеціалізація \_\_\_\_\_  
Семестр 3  
Форма навчання денна  
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) бакалавр  
Навчальна дисципліна: Квантова хімія

### ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ

1. Що таке елементарні частинки і як вони застосовуються у сучасній хімії та фізичних методах дослідження будови речовини? (5 балів)
2. Що називають стаціонарним рівнянням Шредінгера і які фізичні ідеї застосовуються для обґрунтування цього рівняння? Наведіть основні постулати квантової механіки. (5 балів)
3. За допомогою симетрії знайдіть у рамках методу Хюкеля розподіл зарядів на атомах в першому збудженому стані молекулярної структури, що наведена на рисунку



4.  $\alpha_1 = 2$ ,  $\alpha_2 = \alpha_3 = 1$ ,  $\beta_{1,2} = \beta_{1,3} = -1$ ,  $\beta_{2,3} = -2$ , 3 електрона (15 балів)
5. Обчисліть комутатор  $[L_x^2, p_y^2]$ , де  $L_x$  та  $p_y$  - відповідно оператори компонент кутового моменту та імпульсу. (10 балів)
6. У рамках теорії Бора знайдіть енергію, яка потрібна для переведення "атома" мюонію з основного стану у другий збуджений стан. (5 балів)