

## *Список билетов для зачета по дисциплине*

### *Классическая и квантовая механика в биофизике*

#### ***Билет 1***

1. Принцип неопределенности Гейзенберга
2. Методы расчета электронной структуры, основанные на теории функционала плотности. Гибридный функционал B3LYP.

#### ***Билет 2***

1. Типы межмолекулярных взаимодействий.
2. Схема образования молекулы LiH в рамках теории молекулярных орбиталей

#### ***Билет 3***

1. Основы метода молекулярных орбиталей.
2. Металлическая химическая связь.

#### ***Билет 4***

1. Волновые свойства вещества. Волны Де-Бройля.
2. Базисные наборы гауссовских функций.

#### ***Билет 5***

1. Принцип неопределенности Гейзенберга.
2. Типы молекулярных орбиталей.

#### ***Билет 6***

1. Ионный тип химической связи
2. Методы расчета электронной структуры без учета электронной корреляции. Метод Хартри-Фока.

#### ***Билет 7***

1. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры.
2. Гибридизация атомных орбиталей. Гибридизация атома кислорода в молекуле воды.

#### ***Билет 8***

1. Водородная связь.
2. Электронные конфигурации атомов. Принцип Паули. Правило Хунда. Правило Клечковского.

#### ***Билет 9***

1. Гибридизация атома углерода в молекуле CO<sub>2</sub>
2. Электронные оболочки атомов. Квантовые числа и их физический смысл.

#### ***Билет 10***

1. Гибридизация атомных орбиталей и их связь с геометрией молекул.
2. Метод функционала плотности V3LYP

**Билет 11**

1. Методы расчета электронной структуры без учета электронной корреляции. Метод Хартри-Фока.
2. Гибридизация атома углерода в молекуле бензола.

**Билет 12**

1. Донорно-акцепторная и семиполярная связь.
2. Порядок заполнения электронных оболочек, правило Клечковского.

**Билет 13**

1. ЭПР парадокс. Квантовая суперпозиция.
2. Схема образования молекулы NO в рамках теории молекулярных орбиталей

**Билет 14**

1. Волновая функция, граничные условия и ее физический смысл.
2. Квантовые числа и принцип Паули

**Билет 15**

1. Стационарное уравнение Шредингера. Физический смысл волновой функции.
2. Типы межмолекулярных взаимодействий.

**Билет 16**

1. Методы расчета электронной структуры с учетом электронной корреляции. Метод функционала плотности.
2. Схема образования молекулы CO в рамках теории молекулярных орбиталей.