

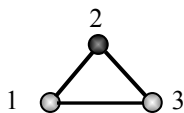
Харківський національний університет ім. В.Н.Каразіна  
Спеціальність 105 прикладна фізика та наноматеріали  
Відділення денне  
Навчальна дисципліна:

Хімічний факультет  
Семестр 1  
ОКР: магістр

### Квантова хімія

## ЕКЗАМЕНАЦІЙНИЙ БІЛЕТ № 13

1. У чому полягає правило Хюккеля для циклічних полієнів? Що таке ароматичність та антиароматичність? Коли правило Хюккеля не застосовне і чому? (10б)
2. Які основні ідеї теорії функціоналу густини? Які переваги та недоліки має ця теорія? Які існують типи обмінно-кореляційних функціоналів? Які функціонали найчастіше використовують для опису органічних молекул? (15б)
3. Використовуючи простий метод Хюкеля, розрахуйте значення енергії, мультиплетності та зарядів на атомах в основному стані молекулярного іона, що зображений на рисунку. (15б)



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

Затверджено на засіданні кафедри прикладної хімії  
протокол № \_\_\_ від “\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2020 р.

Зав. кафедри \_\_\_\_\_ проф. В.А.Чебанов

Екзаменатор \_\_\_\_\_ ст. викл. В. В. Токарев