

## Квантно-хемијске методе (КХМ). Тест 22.06.2017.

Тест садржи 20 питања. Заокружује се један или више тачних одговора (питања могу имати више тачних одговора). За сваки (у потпуности) тачан одговор на питање се добија +5 поена, за нетачан +2 ако је заокружен један тачан исказ (од више могуће тачних), под условом да није заокружен неки нетачан исказ. Ако је у неком питању заокружен барем један нетачан исказ (чак иако је заокружен и неки тачан) добија се -1 поен. За одговор „не знам“ добија се 0 поена.

### 1. У већини софтвера за компјутациону хемију:

А) сви рачуни свих КХМ су аутоматизовани од почетка до краја, **Б)** неке методе се рачунају потпуно аутоматизовано, а за неке је потребно веће знање, В) ни једна метода није аутоматизована, све КХМ имају доста параметара које корисник мора фино подешавати, Г) не знам.

### 2. Хемијске реакције између молекула:

А) брзине хемијских реакција се могу одредити само експериментално методама хемијске кинетике, **Б)** брзине се могу одредити како теоријски, тако и експериментално, В) само појединачни молекули се могу рачунати помоћу КХМ, тако да се реакције не могу описати, Г) не знам.

### 3. За КХМ потребно је да знамо:

А) тачан број електрона и то валентних, остало нас не занима, Б) тачан број свих електрона, остало нас не занима, В) само колико имамо језгара у систему, Г) тачан број језгара и електрона у систему Д) не знам.

### 4. КХМ се рачунају:

А) само неорганска једињења, Б) само органска једињења, **В)** и органска и неорганска једињења, Г) искључиво велики системи, као што су протеини, Д) не знам.

### 5. КХМ третирају атоме:

А) као билијарске кугле са силама између њих налик спрегама, Б) као билијарске кугле са електростатичким силама између њих, **В)** као скуп језгара и електрона са електростатичким силама између њих, Г) не знам.

### 6. КХМ:

А) немају никакве везе са методом молекулских орбитала, Б) Метода молекулских орбитала је претеча квантне хемије, **В)** Метода молекулских орбитала је једна метода квантне хемије, Г) не знам.

### 7. Главни задатак КХМ је пронаћи:

А) што приближније решење егзактном решењу (ако под егзактним сматрамо решење Шредингерове једначине са пуним хамилтонијаном), Б) само егзактна решења, В) решења која су иста као експериментални резултати, Г) не знам.

8. Пертурбациони метод се користи:

А) да се дође до егзактног решења Шредингерове једначине, Б) до приближног решења које има само ниже вредности енергија од егзактних, В) до приближних решења која имају много веће вредности енергије од егзактних, Г) само када у хамилтонијану постоји доминантан члан, Д) не знам.

9. *Ab initio* методе КХ су методе које се:

А) изводе директно из теоријских принципа без употребе експерименталних података, Б) изводе директно из теоријских принципа са врло малом употребом експерименталних података при дефинисању хамилтонијана, В) експериментални подаци се користе од почетка до краја током имплементације ових метода, Г) забрањено је користити било какве математичке апроксимације, Д) не знам.

10. Молекулске орбитале се означавају:

А) према укупном броју електрона у систему; Б) према њиховим типовима симетрије; В) постоји два начина ознака орбитала: молекулске орбитале линеарних молекула се означавају на један начин, а сви други нелинеарни молекули на други начин; Г) не знам.

11. Орбитала је:

А)  $n$ -електронска таласна функција, при чему  $n$  означава укупан број електрона система, Б) искључиво двоелектронска таласна функција, В) једноелектронска таласна функција, при чему се занемарује спин, Г) једноелектронска таласна функција која узима у обзир и спинско стање електрона, Д) не знам.

12. Атомске орбитале које се најчешће користе у квантно-хемијским прорачунима:

А) описују стање једног електрона у нето пољу само валентних електрона, Б) садрже чланове са експоненцијалном функцијом типа  $e(-x^2)$ , В) множе се неком угаоном функцијом да би се добиле орбитале  $s, p, d, f$  типа, Г)  $p$  орбитала се добија када се гаусовске функције помноже координатом  $x$  или  $y$  или  $z$ , Д) не знам.

13. Код ROHF (*restricted open-shell HF*) методе:

А) спарени електрони деле исте просторне орбитале, Б) спарени електрони немају исту просторну расподелу, В) просторна орбитала им зависи од тога да ли је електрон  $\alpha$  или  $\beta$ , Г) најбрже се рачуна од свих Хатри-Фокових метода, Д) нема спинске контаминације, Ђ) веома је значајна спинска контаминација, Е) не знам.

14. Који чланови у хамилтонијану молекула представљају највећи проблем за решавање, због чега се Шредингерова једначина не може егзактно решити. Описати.

15. Методе CI (*Configuration Interaction*) и MCSCF (*Multiconfigurational SCF*), обе узимају за пробну функцију линеарну комбинацију Слејтерових детерминанти. Међутим, њихова основна разлика је:

А) код методе MCSCF не оптимизују се орбитале унутар Слејтерових детерминанти, **Б)** код методе MCSCF се оптимизују и орбитале унутар Слејтерових детерминанти, В) код CI методе се користи варијациони метод, а код MCSCF не, Г) код методе CI се оптимизују коефицијенти испред Слејтерових детерминанти, а код MCSCF не, Д) не знам.

16. Када би се укључиле све могуће конфигурације, пуни CI метод је еквивалентан пуном CC (*Coupled Cluster*) рачуну:

А) да, Б) не, јер се ради о различитим методама, В) не, јер сваки КХ метод узима у обзир различити број електрона за исти систем, Г) не знам.

17. Будући да се таласне функције које се добијају решавањем врло компликованих КХ метода добијају као сума низа Слејтерових детерминанти, при чему су орбитале унутар детерминанти међусобно различите:

А) не може се више дефинисати појам молекулске орбитале, Б) може се дефинисати природна орбитала која има попуњеност од 0 до укупног броја електрона у систему, В) може се дефинисати природна орбитала која има попуњеност тачно 0, 1 или 2, Г) може се дефинисати природна орбитала која има попуњеност од 0 до 2, реални број, Д) не знам.

18. Метода функционала густине (ДФТ):

А) уопште не користи појам орбитале, **Б)** Енергија молекула се одређује из електронске густине, а не директно из таласне функције, **В)** енергија је функција електронске густине, а електронска густина зависи од Кон-Шамових орбитала, Г) егзактан функционал густине јесте познат, Д) егзактан функционал густине није познат, Ђ) не знам.

19. Неки функционали густине су изведени из фундаменталне квантне механике, а неки параметризовањем функција да се добије резултат еквивалентан експерименталном. Стога је метода функционала густине:

А) искључиво *ab initio* метода, Б) искључиво семиемпиријска метода, **В)** постоје и *ab initio* и семиемпиријске верзије ДФТа, Г) не знам.

20. Предности ДФТ методе:

**А)** електронска густина је тродимензиона функција координата, **Б)** могу се комбиновати функционали, користити и део ХФ оператора, В) уопште се не мора користити базни сет, Г) не морају се више креирати нови функционали, јер су постојећи сасвим довољни за опис свих познатих система, Д) не знам.