1. Основные задачи квантовой химии, её отличия от молекулярной механики. Квантовая природа электрона.
2. Уравнение Шрёдингера, понятие волновой функции.
3. Зависимость уравнения Шрёдингера от времени, стационарные решения.
4. Приближение Борна-Оппенгеймера и его применимость.
5. Релятивистские эффекты в движении электронов; важность их учёта в квантовохимическом моделировании.
6. Способы учёта релятивистских эффектов в квантовохимическом моделировании.
7. Численные методы решения уравнения Шрёдингера, их классификация.
8. Принцип Паули, метод Хартри-Фока (ограниченный и неограниченный), приближение МО-ЛКАО.
9. Вариационный принцип и метод самосогласованного поля.
10. Влияние выбора квантовохимического метода на результат расчёта.
11. Эффект компенсации ошибок метода.
12. Роль базисных наборов в квантовохимических расчётах.
13. Типы базисных функций, группировка (контрактация) гауссовых базисных функций.
14. Расщепленность базисного набора, её роль в описании поведения электронов.
15. Поляризационные и диффузные базисные функции, их роль в описании поведения электронов.
16. Семейства базисных наборов. Их предназначения и различия.
17. Базисные наборы с псевдопотенциалами, их достоинства и недостатки.
18. Ошибка суперпозиции базисного набора (BSSE) и эффект компенсации ошибок метода.
19. Методы теории функционала плотности и их классификация. Их достоинства и недостатки.
20. Обменная и корреляционная энергии в теории функционала плотности (ТФП). Достоинства и недостатки методов ТФП.
21. Точный функционал теории функционала плотности, его свойства.
22. Локальные и полулокальные приближённые функционалы, их различия, достоинства и недостатки.
23. Гибридные приближённые функционалы, их достоинства и недостатки.
24. Природа дисперсионных взаимодействий и проблема их учёта в методе теории функционала плотности.
25. Способы учёта дисперсионных взаимодействий в методах теории функционала плотности.
26. Движение атомов в химических процессах. Конформационные переходы, поверхность потенциальной энергии.
27. Типы стационарных точек на поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Способы определения типа стационарной точки на ППЭ.
28. Способы учёта конформационной подвижности химических систем.
29. Энергия нулевых колебаний (ZPE), способы расчёта энтальпии и свободной энергии Гиббса молекул.
30. Больцмановское распределение и его роль в молекулярном моделировании.
31. Моделирование скорости химической реакции.
32. Типы контроля химических реакций. Моделирование соотношения продуктов в реакциях с кинетическим контролем. Уравнение Кёртина-Гаммета, условия его выполнения.
33. Типы контроля химических реакций. Моделирование соотношения продуктов в реакциях с термодинамическим контролем.
34. Модельная система. Влияние выбора модельной системы на надёжность результатов моделирования.
35. Связь величины модельной системы и количества её стационарных состояний.
36. Взаимодействие химической системы с окружающими молекулами, сольватация.
37. Влияние сольватации на предпочтительные конформации системы.
38. Способы учёта сольватации.
39. Модели неявного учёта растворителя.
40. Модели явного учёта молекулярного окружения.
41. Методы описания электронных возбуждений молекул.
42. Моделирование УФ-спектров. Происхождение Стоксова сдвига.
43. Моделирование ИК-спектров. Поправочные коэффициенты, их физический смысл.
44. Моделирование ЯМР-спектров.