**Строение и динамика молекул**

**Вопросы к зачету:**

1. Практическое применение оператора эволюции: основные идеи и приближения.

2. Сходство и различия стационарного и динамического критериев адиабатичности процессов.

3. Гамильтонова динамика молекулярных систем. Границы корректного использования сил Гельмана–Фейнмана.

4. Алгоритмы расчета перемещений частиц и их скоростей при динамическом моделировании.

5. Лагранжева динамика молекулярных систем: преимущества и ограничения в сравнении с гамильтоновой динамикой.

6. Базовые конструкции квазиклассической динамики. Возможности и недостатки в сравнении с классическим и квантовым вариантами.

7. Неадиабатическая динамика с перескоками между адиабатическими потенциалами: связь с классическим критерием Месси.

8. Диабатические состояния и преимущества их использования в качестве базиса при изучении динамики молекулярных систем.

9. Условия Эккарта и границы их применимости. Колебательно-вращательное взаимодействие и колебательный угловой момент.

10. Инверсия и внутреннее вращение как основные типы движений большой амплитуды. Равновесные и опорные конфигурации молекул.

11. Нормальные колебания молекул и эффективные колебательные моды.

12. Основные идеи построения силовых полей. Варианты комбинирования квантового и классического описания при моделировании больших молекулярных систем.

13. Сечение реакционного столкновения молекул. Варианты определения констант скорости процесса.

14. Основные приближения, лежащие в основе уравнений Траутца-Льюиса и Эйринга. Возможность учета туннельных эффектов.

15. Основные идеи, лежащие в основе анализа кинетики сложных процессов.