

שאלות הכנה עבור מעבדת HyperChem - חלק מספר 1

1. החישובים המבוצעים במעבדה מתבססים על קירוב בורן אופנהיימר.
 - א. הסבירו בקצרה את משמעות הקירוב. מתי הוא נשבר?
 - ב. האם תוכלו לחשוב על סוג מולקולות עבורן הקירוב לא מתאים?

2. הסבר בשניים שלושה משפטים את כל אחד משלושת סוגי החישוב הבאים:
 - א. חישובי molecular mechanics
 - ב. חישובים סמי-אמפיריים
 - ג. חישובי ab-initio
 מהם היתרונות והחסרונות של כל אחת מהגישות?

3. הסיבוכיות החישובית של חישובי מבנים אלקטרוניים נובעת מהאנרגיה הפוטנציאלית של אינטראקציות אלקטרון-אלקטרון. כיצד מתמודדת שיטת הרטרי-פוק עם הבעיה הזו?

4. בתום תהליך החישוב של הרטרי פוק (HF-SCF) מתקבל סט של אורביטלים.
 - א. מהם ה-occupied orbitals וה-virtual orbitals?
 - ב. כיצד נבנית פונקציית הגל של הרטרי פוק? (רמז: היזכרו בכלי המתמטי אשר נקרא דטרמיננטת סלייטר)

5. באמצעות שיטת HF-SCF התקבל כי האנרגיה של מולקולת מים הינה -76.065 [Hartree].
 - א. מדוע האנרגיה שלילית?
 - ב. השלימו את טבלת מעברי היחידות הבאה:

Units	Hartree (atomic units)	eV	Kcal/mol	Kj/mol
Value				