

שאלות הכנה עבור מעבדת HyperChem - חלק 2

שיטות מכניקה מולקולרית

1. במה נבדלות שיטות חישוב שונות השייכות לגישת המכניקה המולקולרית?
2. רוב ה-force fields משתמשים ב-cutoff distance, כלומר מרחק מקסימלי שהחל ממנו אינטראקציות בין אטומים לא נלקחות בחשבון. האם תוכלו לחשוב מדוע?

אופטימיזציה גיאומטרית

3. במעבדה אנחנו מבצעים חישובי אופטימיזציה גיאומטרית (geometry optimization) שמטרתם למצוא את הגיאומטריה היציבה ביותר עבור מערכת מולקולרית.
 - א. מהו חישוב אנרגיה בנקודה? (single point energy calculation)
 - ב. מהו משטח פוטנציאל אנרגטי (potential energy surface) ומה הקשר בינו לבין חישוב אנרגיה בנקודה?
4. במעבדה נשתמש בשיטות חישוב מסוג HF ו-MM לחישוב אופטימיזציות גיאומטריות.
 - א. מהן אנרגיות הייחוס (אנרגיות האפס) בחישוב בגישת המכניקה המולקולרית ובחישוב הרטרי-פוק?
5. כיוון שחישוב אופטימיזציה גיאומטרית מחפש מינימום אנרגטי, קיים סיכוי להתכנס למינימום לוקאלי אך לא גלובלי. כיצד אנחנו מתמודדים עם בעיה זו?

Bonus questions:

- 1) Define eigenvectors and eigenvalues of a square matrix B_{ij} (write out an expression).
- 2) Write out the Taylor expansion for a function $E(x_1, x_2)$ of two variables x_1, x_2 up to the terms of second orders (inclusively).