

## שאלות הכנה במעבדה בכימיה חישובית לקראת ניסוי מספר 1 בעזרת

### תוכנת Gaussian :

1. מהו בסיס מינמלי? בסיס split valence? בסיס polarized ?
  2. האם בשימוש בבסיס גדול יותר (המכיל פונקציות בסיס נוספות ביחס לבסיס המקורי) נקבל תוצאות מדויקות יותר?
  3. מהם היתרונות והחסרונות בשימוש בבסיסים גדולים בחישובים קוונטיים?
  4. מהן התוצאות האפשריות מחישוב אופטימיזציה?
  5. נערכו שני חישובי אופטימיזציה גיאומטרית של מולקולת מים בשיטת Restricted Hartree-Fock. בחישוב הראשון נעשה שימוש בבסיס בשם 3-21G ובחישוב השני נעשה שימוש בבסיס בשם 6-311G. ה בסיס 3-21G מכיל במקרה של מולקולת מים 13 פונקציות בסיס ואילו הבסיס השני מכיל במקרה של מולקולת מים 19 פונקציות בסיס.
- מהו מספר האורביטלים המולקולריים שהתקבלו בכל אחד מן החישובים שבוצעו? כמה מן האורביטלים המולקולריים הללו יאוכלסו באלקטרונים בכל אחד מהמקרים? הסבר.