

שאלות הכנה במעבדה בכימיה חישובית לקראת ניסוי מספר 2 בעזרת

תוכנת גאוסיאן :

שאלות אלו יעסקו בנושאים הבאים :

ROHF, UHF, RHF, פונקצית גל אלקטרונית, פונקצית צפיפות אלקטרונית, אורביטל קושר ואורביטל אנטי קושר.

1. שיטות ROHF ו-UHF, RHF - חזרה :

השלם את הטבלה הבאה :

| ROHF | UHF | RHF | שאלה | סעיף |
|------|-----|-----|--|------|
| | | | האם בשיטה זו נעשה שימוש בחישוב האינטרקציה שבין אלקטרון לענן אלקטרוני כקירוב לאינטרקצית הדחיייה המפורשת בין האלק' במערכת? | 1 |
| | | | האם נלקחת הקורלציה האלקטרונית בחשבון בחישוב בעזרת שיטה זו באופן מפורש? | 2 |
| | | | האם נלקחת הקורלציה האלקטרונית בחשבון בחישוב בעזרת שיטה זו באופן מקורב? | 3 |
| | | | האם שיטה זו איטרטיבית? | 4 |
| | | | מהו מספר האלקטרונים המקסימלי של כל אורביטל מולקולרי המחושב בשיטה זו? | 5 |
| | | | האם כל אורביטל מולקולרי המחושב בעזרת שיטה זו הינו קומבינציה לינארית של פונקציות הבסיס? | 6 |
| | | | האם כל אורביטל מולקולרי המחושב בעזרת שיטה זו הינו דטרמיננטת סלייטר של פונקציות הבסיס? | 7 |
| | | | האם נלקחת אינטרקציה השחילוף בחשבון בחישוב בעזרת שיטה זו? | 8 |
| | | | האם פונקצית הגל המתקבלת בחישוב בעזרת שיטה זו הינה דטרמיננטת סלייטר של פונקציות הבסיס? | 9 |
| | | | האם פונקצית הגל המתקבלת בחישוב בעזרת שיטה זו הינה דטרמיננטת סלייטר של האורביטלים המולקולריים שחושבו? | 10 |
| | | | האם יתכנו שני אלקטרונים של מערכת מולקולרית שחושבה בעזרת שיטה זו השייכים לאורביטלים מולקולריים בעלי חלק מרחבי זהה וחלק ספיני זהה? | 11 |

| ROHF | UHF | RHF | שאלה | סעיף |
|------|-----|-----|--|------|
| | | | האם יתכנו שני אלקטרוניים של מערכת מולקולרית שחושבה בעזרת שיטה זו השייכים לאורביטלים מולקולריים בעלי חלק מרחבי זהה וחלק ספיני שונה? | 12 |
| | | | האם ניתן לחשב בעזרת שיטה זו מערכות מולקולריות בעלות קליפה פתוחה? | 13 |
| | | | האם ניתן לחשב בעזרת שיטה זו מערכות מולקולריות בעלות קליפה סגורה? | 14 |
| | | | האם ניתן לחשב בעזרת שיטה זו אטומים? | 15 |
| | | | האם ניתן לחשב בעזרת שיטה זו מערכות מולקולריות טעונות (בעלי מטען כולל שאינו נייטרלי)? | 16 |

2. האם ניתן לקבוע באופן וודאי כי חישוב בעזרת שיטת UHF של מערכת מולקולרית מסויימת צפוי לתת אנרגיה נמוכה יותר מאשר חישוב בעזרת שיטת ROHF של אותה מערכת (בהנחה ששני החישובים בוצעו בעזרת אותו הבסיס)? נמק את תשובתך!

3 ברצוננו לחשב ספקטרום NMR של מערכת קליפה פתוחה בעזרת שיטת הרטרי-פוק, באיזו שיטה מומלץ להשתמש? הסבר את תשובתך!
מעבדה מספר 2 בתוכנת גאוסיאן עוסקת בין השאר בחישוב פונקציות הגל האלקטרונית וחישוב פונקציות הצפיפות האלקטרונית של מערכת מולקולרית. נניח כי נתבקשנו לבצע חישוב אנליזת איכלוס של מולי מים
4. פונקציות הגל האלקטרונית המחושבת תהיה פונקציה של
א. 10 משתנים (הקואורדינטות של כלל האלק' במערכת).
ב. 20 משתנים (הקואורדינטות של 10 האלק' במערכת + 10 משתני ספין).
ג. 40 משתנים (3 קואורדינטות מיקום של כל אחד מהאלק' במערכת + 10 משתני ספין).
ד. 50 משתנים (3 קואורדינטות מיקום של כל אחד מהאלק' במערכת + 2 משתני ספין, α ו- β , לכל אלק').

5. פונקציות הצפיפות האלקטרונית המחושבת תהיה פונקציה של
א. משתנה יחיד (של המקום).

ב. שלושה משתנים (x, y, z ו- z של המרחב).

ג. 13 משתנים (שלושה משתני מקום ו-10 משתני ספין).

ד. 23 משתנים (שלושה משתני מקום ו-20 משתני ספין).

6. הגדר מהו אורביטל קושר ומהו אורביטל אנטי קושר?