

שאלות הכנה במעבדה בכימיה חישובית לקראת הניסוי בעזרת תוכנת

Gaussian חלק מספר 4 :

1. כיצד מוגדרת אנרגיית אקטיבציה של תגובה?
2. כיצד ניתן לאפיין מצב מעבר מבחינה מתמטית?
במעבדה זו נעשה שימוש בשלוש שיטות לקביעת מצב מעבר של תגובה: (TS)Bery, QST2 ו-QST3.
3. באלו מן השיטות הנ"ל יש צורך בניחוש התחלתי של מצב מעבר לביצוע החישוב?
בחלק השני של הניסוי נשתמש במצב המעבר המחושב לצורך חישוב מהלכי ריאקציות (reaction paths).
4. שאלת רשות:
בצענו חישוב QST2 למצב המעבר של תגובה מסוימת, הצע שלוש דרכים שונות כדי לאשש מצב מעבר זה.