



## שם הקורס

מעבדה בכימיה חישובית 4810-0351

## מרצה

פרופ' אפרים אליאב

## סמסטר

ב

## דרישות הקורס

אין למעבדה זו דרישות קדם פרט לקורס בכימיה כללית (שנה א') והקורס הבסיסי בכימיה פיזיקלית (שנה ב') הכולל הקדמה בכימיה קוונטית

## הרכב הציון הסופי

10%	שאלות הכנה (אישי)
25%	הערכת המדריך במהלך המעבדה (אישי)
25%	דוח מסכם (זוגי)
15%	בחנים (אישי)
25%	הערכת אחראי במעבדה (אישי)

## מבנה הקורס

תאריך / מס' שיעור	נושא השיעור ותכני השיעור (מטלות, רשימת קריאה, משימות וכיו"ב)
1	מבוא לכימיה חישובית (הרצאה), דרישות הקורס, משאבי אינטרנט, מבוא לתוכניות HyperChem וגאוסיאן מידע נוסף לסטודנטים
2	תשובות לשאלות פשוטות בכימיה קוונטית וחישובית מבוא למכניקה מולקולרית (הרצאה) מבוא ל- HyperChem - הרצאה אינטראקטיבית HyperChem מעבדה מס' 1 (חלק א')
3	בוחר מס' 1: חישובים במכניקה מולקולרית, חצי אמפיריים, ab-initio, חישוב איטרטיבי, מצב התכנסות, פונקצית גל וצפיפות אלקטרונית אופטימיזציה גיאומטרית (הרצאה) HyperChem מעבדה מס' 1 (חלק ב')
4	ערכות בסיס RHF, ROHF ו-UHF (הרצאה) קלט גאוסיאן - הרצאה אינטראקטיבית תפוקת גאוסיאן - הרצאה אינטראקטיבית גאוסיאן מעבדה מס' 1 (חלק א')
5	שילות ותשובות בכימיה חישובית גאוסיאן מעבדה מס' 1 (חלק ב')



מטריצת צפיפות וניתוח איכלוסין (הרצאה) GaussView - הרצאה אינטראקטיבית גאוסיאן מעבדה מס' 2 (חלק א')	6
סדר קשר כימי מאנליזת MULLIKEN (הרצאה) גאוסיאן מעבדה מס' 2 (חלק ב')	7
בוחר מספר 2: ערכות בסיס, ROHF, RHF & UHF, אורביטלים, Mulliken, מטריצת צפיפות גאוסיאן מעבדה מס' 3 (חלק א')	8
שיטות רבות-גוף ו-DFT ב כימיה חישובית-קוונטית (הרצאה) גאוסיאן מעבדה מס' 3 (חלק ב')	9
מצב מעבר ודרכי תגובה כימית (הרצאה) גאוסיאן מעבדה מס' 4	10
הרצאת NMR ו-IR גאוסיאן מעבדה מס' 5	11
בוחר מספר 3: מיטוב גיאומטרי וחישובי נקודת מעבר, מצב התכנסות, ספקטרום NMR + IR הרצאה דינמית מולקולרית HyperChem מעבדה מס' 2 (חלק א')	12
שילות ותשובות בכימיה חישובית. שיעור מסכם HyperChem מעבדה מס' 2 (חלק ב')	13

## קריאת חובה

F. Jensen "Introduction to Computational Chemistry" John Wiley & Sons, 3d edition (2017)

## קריאת רשות

I. N. Levine "Quantum Chemistry" Prentice Hall, 7th edition (2014)

## הערות

מטרת מעבדה זו להקנות לתלמידים ידע ראשוני ויכולת בסיסית בפתרון בעיות חישוביות בכימיה תוך שימוש בתוכנות מסחריות מהנפוצות בעולם: GAUSSIAN ו-HYPERCHEM. אין צורך בידע בתכנות או בשיטות חישוב, וכמו כן המעבדה אינה דורשת ידע עמוק בכימיה תאורטית. הדגש הוא על הכרת היכולות שתוכנות אלה מאפשרות למשתמשים המעוניינים בהבנת התכונות הכימיות (מבנה, אנרגטיקה, תכונות אלקטרוניות) והתהליכים במערכות שאותן הם חוקרים  
אתר הקורס: <http://www.tau.ac.il/~ephraim/complab.html>