

Checklist – Computational lab reports

זו טבלת הניקוד שאני עובדת איתה בעת בדיקת דו"חות. כאשר אתם כותבים את הדו"ח המסכם, תוכלו לעבור על הטבלה ולוודא שיש לכם הכל.

נושא	ניקוד מופחת	פירוט
הסבר של מה עשיתם	2 נקודות בכל פעם	עבור כל שלב בניסוי, יש להסביר מה עשיתם. דוגמא לסבר טוב: "בחלק זה של הניסוי בחנו את המחסום האנרגטי של המעבר של מולקולת האתן מקפורמציית <i>staggered</i> לקונפורמציית <i>eclipsed</i> . חישובים התבצעו בשיטת הרטרי-פוק בארבעה בסיסים ההולכים וגדלים (<i>STO-3G</i> , <i>3-21G</i> , <i>6-31G</i> , <i>6-31G(d)</i>), כאשר כל פלט של בסיס מסוים שימש כקלט של הבסיס הבא בגודלו." אין לשים טבלאות ללא הסבר מקדים.
דיווח שגיאות	2 נקודות, חד פעמי	יש לדווח את השגיאה לכל ערך מחושב. לחילופין, ניתן לתאר פעם אחת בתחילת הדו"ח כיצד אתם מעריכים את השגיאות ולא לרשום שגיאה עבור כל ערך, בהינתן כמובן שההערכה זהה עבור כל הערכים המחושבים לאורך הדו"ח.
דיון בתוצאות	עד 7 נקודות לכל דיון, בהתאם לפירוט	תוצאות ללא דיון הן חסרות משמעות. דיון טוב מכיל את הנקודות הבאות: 1. הסבר על התוצאות: מה אנחנו רואים בטבלה? אנרגיות? אורכי קשר? כפונקציה של מה? (1 נקודות) 2. השוואה לערך התאורטי, אם ניתן בתדריך. האם התוצאה שונה? בכמה היא שונה? מדוע? (2 נקודות) 3. מה ציפיתם לקבל? (1 נקודות) 4. האם התוצאות תואמות את הציפיות שלכם? מדוע? התייחסו להנחות אותם מבצעים החישובים, לרמת הדיוק של החישובים, לבעיות התכנסות אם היו וכיוצא בזאת. (2 נקודות) 5. כיצד הייתם יכולים להעלות את דיוק החישובים שלכם, או את הקרבה לתוצאות התאורטיות? למשל, פרמטרים אותם הייתם יכולים לשנות בתוכנה כגון מספר לולאות ה-SCF. אופציה אחרת המתאימה למולקולות מסויימות (איזה מולקולות?) היא התחשבות בקורלציות. אפשרויות נוספות הן העלאת הבסיס (אם לא התכנס!), התחשבות בטמפרטורה וכיוצא בזאת. (1 נקודות)
בעיות התכנסות	2 נקודות בכל פעם	לעתים קורה כי גאוסיאן לא מצליחה להתכנס עבור מולקולות מסויימות. בפועל, ישנן דרכים (כגון אלה שפירטתי בבדיקת הדו"ח האחרון שלכם) בהן כן היינו מצליחים לכנס את החישוב. כאשר נתקלתם במולקולה שלא מתכנסת, רשמו: 1. מה כן ניסיתם? (שינוי גיאומטריה, שינוי פרמטרי הרצה וכו'). (1 נקודות) 2. מה הייתם משנים, לו היה דרוש מכם לכנס את המולקולה (למשל, אם הייתם מוציאים מאמר על מולקולה נתונה עם בעיות התכנסות). (1 נקודה)

בּונוס (עד 10 נקודות, בהתאם לרמה)

בּונוס יינתן במקרים הבאים:

1. כתיבת דיון מעמיק ברמה גבוהה.
2. ביצוע חישובים מעבר לדרוש, אשר תורמים להבנה של התוצאות, על פי יוזמה אישית שלכם.
3. הצעה לשאלת מחקר אחרת שהייתה מעניינת אתכם מעבר לשאלה שהוצגה, וכיצד הייתם חוקרים אותה באמצעות הכלים שיש לכם במעבדה?

דברים שמבחינתי לא דרושים

מבחינתי הכי חשוב לראות את ההבנה שלכם, ולכן הדברים הבאים לא חיוניים בדו"ח (אבל אם אתם רוצים בכל זאת לשים אותם, אין בעיה):

1. טבלאות של הקונפיגורציות ההתחלתיות שניתנו לכם בתדריך כאינפוט.
2. לעתים שמים לכם תמונות של מולקולות בתדריך עצמו. אין צורך להעתיק את התמונות האלה לדו"ח. שימו לב שהציורים של המולקולות שאתם מקבלים מהחישובים שלכם ב-GaussView כן חשובים כמובן.