

Práctica 15: Modelización Molecular del Etano (Cálculo Semiempírico)

1.- Minimizar la molécula de etano utilizando el programa MOPAC (*keywords necesarias: AM1 EF GRAPH*) y responder a las cuestiones siguientes:

Distancia C-H: Distancia C-C: Ángulo H-C-H: Ángulo H-C-C: Ángulo diedro H-C-C-H: Energía Electrónica:		Potencial de Ionización: Energía Total: Energía de Repulsión: Momento Dipolar: Calor de formación:	
--	--	--	--

Cargas Atómicas Parciales

C1		C2		H3		H4	
H5		H6		H7		H8	

2.- Ver la distribución de cargas.

3.- Comparar los resultados obtenidos del cálculo semiempírico con los que se obtuvieron en el cálculo de Mecánica Molecular (*Práctica nº 2*).

4.- Ver los Orbitales Moleculares del etano. Indicar la energía en Kcal/mol de cada uno de ellos.