

Evaluación del Tema 3

Usando el Hamiltoniano PM3, ordenar por orden de energía ascendente los siguientes carbocationes: metilio, etilio, prop-2-ilio, 2-metil-prop-2-ilio, 1-metoxietilio, 2- cloroetilio y 2-cianoetilio.

1.- ¿Cuál es la energía del orbital molecular que soporta la carga positiva en cada una de estas estructuras?

2.- ¿Existe correlación entre la entalpía de formación y la energía de este orbital?

3.- Representar gráficamente e interpretar el LUMO de cada estructura y justificar en base a estos resultados el orden energético obtenido para las entalpías de formación.

4.- ¿Qué ocurre cuando se calcula la energía del catión 2-metil-prop-1-ilio utilizando el hamiltoniano PM3?. Si se repite el cálculo añadiendo la keyword GNORM=0.0001, ¿cuál es el resultado que se obtiene?