

Práctica 16: Modelización Molecular del Eteno (Cálculo Semiempírico)

1.- Minimizar la molécula de eteno 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	

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 3*).

4.- Dibujar la interpretación de los Orbitales Moleculares del eteno. Indicar la energía en Kcal/mol de cada uno de ellos.