

Práctica 14: Modelización Molecular del Metano (Cálculo Semiempírico)

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

Distancia C-H:

Ángulo H-C-H:

Calor de Formación:

Energía Total:

Energía Electrónica:

Energía de Repulsión:

Potencial de Ionización:

Momento dipolar:

Cargas atómicas Parciales:

| | | | | | | | | | |
|----|--|----|--|----|--|----|--|----|--|
| C1 | | H1 | | H2 | | H3 | | H4 | |
|----|--|----|--|----|--|----|--|----|--|

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 1*).

4.- Dibujar los Orbitales Moleculares ocupados del metano. Calcula la energía en Kcal/mol de cada uno de ellos.