

Práctica 18: Cálculo Semiempírico del N₂

Existe una base de datos denominada *Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase* donde se pueden consultar los datos experimentales y teóricos de múltiples moléculas que han sido descritos por diversos grupos de investigación (*Nota: para realizar una búsqueda es necesario pulsar en Experimental Data (en el menú Izquierdo) y All Experimental Data for One Molecule en la página principal*).

- 1.- Usando esta base de datos, para conocer la distancia experimental, y el programa BrandyMol realiza el Cálculo Semiempírico de la molécula de N₂ empleando los Hamiltonianos AM1 y PM3 (*Usar como palabras clave: AM1 GEO-OK GRAPH EF, o bien PM3 GEO-OK GRAPH EF*).
- 2.- Indica la distancia de equilibrio y el potencial de ionización obtenido con ambos Hamiltonianos y compáralos con los obtenidos de forma experimental.
- 3.- Interpreta y dibuja los Orbitales Moleculares ocupados del Nitrógeno.