

PRÁCTICA #2 (15%)

Propiedades de sistemas moleculares

Abril 21, 2025

Profesor: Carlos Jiménez

Estudiante: _____

Documento: _____

Utilice el código **xTB** para brindar respuestas a lo solicitado para su sistema molecular, el cual es: _____.

Programas necesarios:

xTB: En Anaconda.

ASE: En Anaconda.

Jmol (<https://jmol.sourceforge.net/>)

Multiwfn (<http://sobereva.com/multiwfn/>)

1) (20%) Optimización de estructura, análisis de cargas atómicas y órdenes de enlace.

a) Consulte en PubChem su molécula asignada, cuyo PubChem CID es: _____. Abra la estructura con ASE GUI, guarde el archivo en formato .xyz y optimice la estructura (indique cómo hacerlo).

b) Use los archivos generados en la optimización. Visualice los átomos involucrados en el archivo *xtbopt.xyz* y use el archivo *charges* para establecer la carga atómica respectiva. Identifique la carga de los átomos de oxígeno y los átomos de carbono adyacentes a estos. Brinde una explicación de su significado e implicaciones, de acuerdo con lo visto en clase y apoyado en lecturas que considere pertinentes (incluir referencias).

c) Elija cuatro (4) conectividades para establecer el orden de enlace (use archivo *wbo*) respectivo, es decir, cuatro enlaces entre átomos diferentes. Explique cómo establece los órdenes de enlace e incluya la interpretación de cada orden de enlace establecido.

2) (30%) Aspectos vibracionales de molécula asignada.

a) Use la geometría del sistema optimizado en el *Punto 1a*. Realice cálculo de frecuencias. Indique cómo hacerlo. De acuerdo con el tamaño del sistema, se cumple que la matriz Hessiana tenga un tamaño de $3N \times 3N$, donde N: cantidad de átomos en la molécula? Explique.

b) En cálculos relacionados con infrarrojo y aspectos vibracionales, los gráficos que se realizan son de intensidad vs número de onda. Consulte i) qué es el número de onda, ii) qué relación tiene con la energía de cada vibración y iii) cómo entender que se exprese en unidades de cm^{-1} .

c) Determine la cantidad de modos normales de vibración ($\text{nmv}=3N-6$ ó $\text{nmv}=3N-5$) que se espera se tengan en la molécula analizada. Abra el archivo *g98.out* con un editor (*vim*, *gedit*, etc.) y verifique que se tenga una igual cantidad de frecuencias. Explique.

d) Abra el archivo *g98.out* con el programa *Jmol* para visualizar las frecuencias. Identifique cinco (5) frecuencias diferentes. Para cada una indique lo siguiente.

En “tipo de vibración”, indique si se trata de *stretching* o *bending*, y en “explicación de vibración”, incluya con sus palabras una descripción detallada del tipo de vibración involucrada, incluyendo nombres de grupos funcionales analizados.

Número de onda (cm ⁻¹)	Intensidad (km*mol ⁻¹)	Tipo de vibración	Explicación de vibración

e) Luego de completar la tabla, consulte el número de onda (o rangos de número de onda) conocidos para el grupo funcional analizado. Por ejemplo, si la frecuencia calculada para el grupo funcional X (aldehído, cetona, éter, etc.) es de 123.45 cm⁻¹, se realiza búsquedas bibliográficas donde se tenga reportes cercanos a 123.45 cm⁻¹ para el grupo funcional X que usted esté analizando. Incluya las referencias respectivas. Recuerde que las señales de infrarrojo (números de onda) son una “huella dactilar” de los grupos funcionales analizados y de los diferentes tipos de vibración observados en una molécula.

3) (30%) Orbitales moleculares en molécula asignada.

- a) Use la geometría del sistema optimizado en el *Punto 1a*. Realice cálculo de orbitales. Indique cómo hacerlo y genere el archivo *molden.input*.
- b) Consulte qué son los orbitales HOMO y LUMO. Incluya las referencias respectivas.
- c) Use el programa *Multiwfn* para abrir el archivo *molden.input* y visualizar los orbitales moleculares (usando visual tipo *mesh*). Explique cómo lo hace.
- d) Identifique el HOMO cuyo orbital es el #: ____, y el LUMO cuyo orbital es el #: _____. Visualice el HOMO y el LUMO. Genere imágenes que considere pertinentes.

4) (20%) Orbitales moleculares en molécula diferente.

- a) Use el CO₂ en formato .xyz. Puede generarlo con ASE, por ejemplo. Explique. Optimice y luego genere el respectivo archivo *molden.input*. Ubique el HOMO, orbital # ____ y el LUMO, orbital # _____. Genere las imágenes que considere adecuadas.
- e) Use los HOMO y LUMO de las dos moléculas (*Punto 3* y *Punto 4*). Al interactuar ambas moléculas, ¿qué reactividad química se espera? Explique. Sea tan detallado con lo considere.

Bonificación (30%)

En el cálculo de vibraciones, se genera archivo *vibspectrum*. El espectro infrarrojo calculado de su molécula, es un insumo relevante para aquellos investigadores que realicen experimentos con su molécula, que incluso se podría contrastar con el infrarrojo experimental.

B1) (20%) Grafique intensidad vs número de onda para así obtener el espectro infrarrojo. Use *Pandas* y *Matplotlib*. Explique las líneas de código usadas.

B2) (10%) Busque espectro infrarrojo experimental. Contraste su espectro infrarrojo calculado con el experimental (en un mismo gráfico). Discuta al respecto.