

## Sesión Práctica N°5: Simulación de Pequeñas Moléculas

En esta sesión práctica nos vamos a familiarizar con los programas Molden y ORCA, para la visualización de moléculas y el cálculo cuántico de energías.

### Pregunta 1

Emplea MOLDEN para dibujar la molécula de ácido acético: SMILES "CC(O)=O" y guarda el archivo en formato XYZ.

### Pregunta 2

Emplea MOLDEN para dibujar la molécula de benceno. Guarda el archivo en formato XYZ.

### Pregunta 3

Emplea MOLDEN para dibujar una molécula de agua y guárdala en el formato de entrada de ORCA, es decir, "INP". Considera Opt Def2-SV(P) en el tipo de cálculo y nivel de cálculo (nivel de teoría + base).

### Pregunta 4

Asigna la carga y multiplicidad correspondientes al ácido acético y al acetato (ácido acético desprotonado).

### Pregunta 5

¿Cuál es la carga y multiplicidad del (a) metano y (b) oxígeno molecular?

### Pregunta 6

¿Cuántas funciones de base y funciones gaussianas se necesitan para describir el metano al aplicar la función mínima (simple zeta)?

### Pregunta 7

¿En qué se diferencian las bases de Pople: 6-31G(d) y 6-311++G(d,p)?

### Pregunta 8

Optimiza la estructura del agua usando ORCA ¿Cómo identificas que ya está optimizada? ¿Qué palabras clave son importantes para analizar el output desde la terminal?

**Pregunta 9**

¿Cómo visualizar la convergencia de la energía usando MOLDEN?

**Pregunta 10**

¿Cómo calculamos las frecuencias vibracionales de la molécula del agua?

**Pregunta 11**

¿Calcula las frecuencias para el ácido acético?

**Pregunta 12**

¿Cómo visualizas las frecuencias para el ácido acético?

**Pregunta 13**

¿Cómo visualizas los orbitales del ácido acético usando MOLDEN?

**Pregunta 14**

Realiza el cálculo de frecuencias para la molécula de etanol y obten las energías de sus orbitales frontera (HOMO y LUMO).

**Pregunta 15**

Realizar el cálculo de frecuencias de la molécula de DMSO y obten su energía brecha o energía gap (Energía de LUMO - Energía de HOMO).