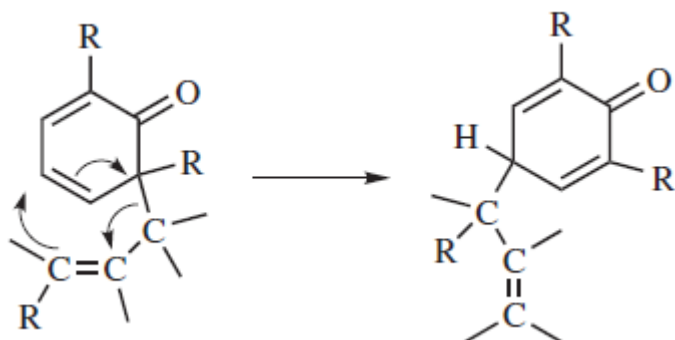


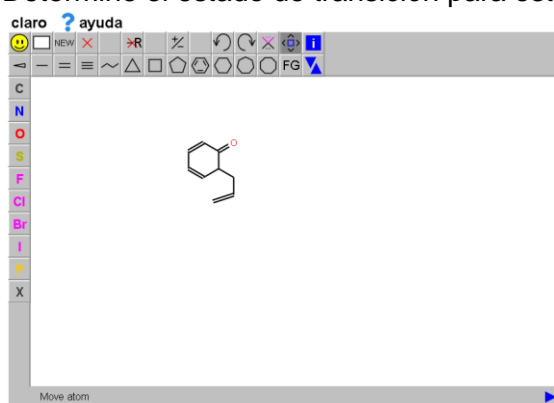
PRIMER PARCIAL DE QUIMICA COMPUTACIONAL

Nombre: José Trillos / 0ec-0003-00121

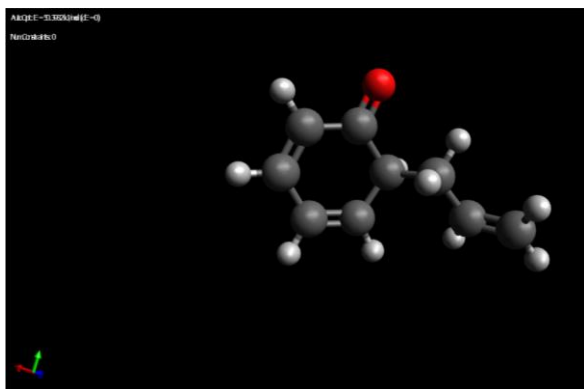
PROBLEMA 1: TRANSPOSICIÓN DE CLAISEN



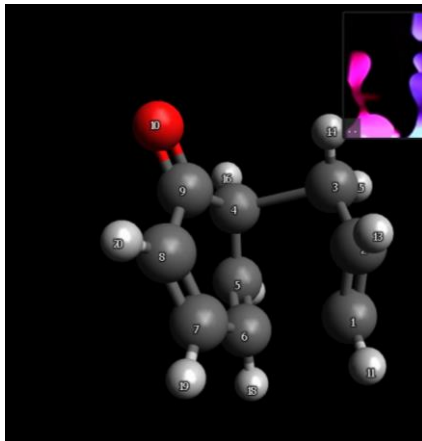
- a) Determine el estado de transición para esta reacción de transposición de Claisen



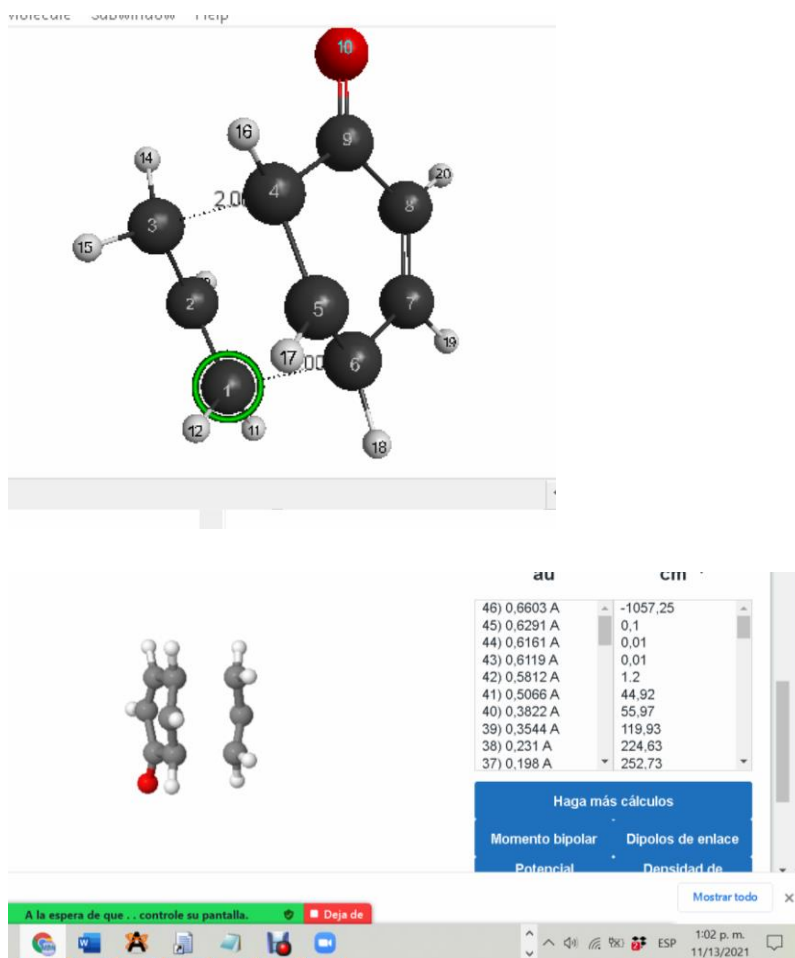
Construcción de la molécula 1ª en el chemcoputer

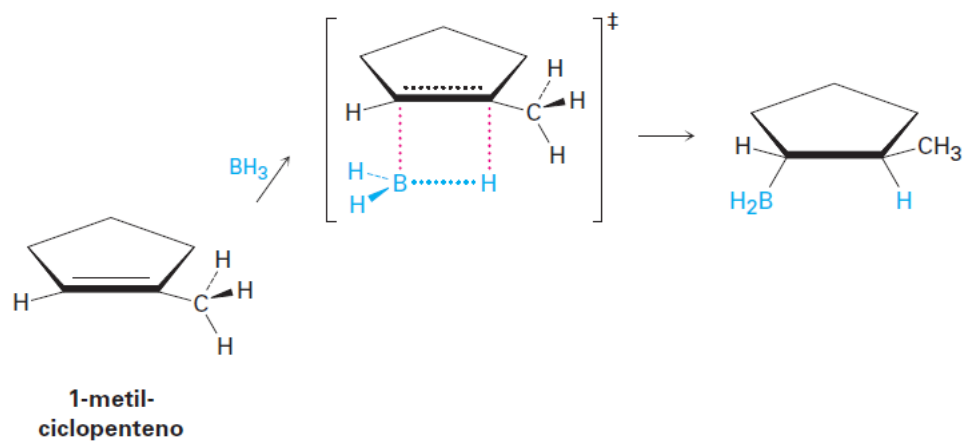


Introducción al Avogadro

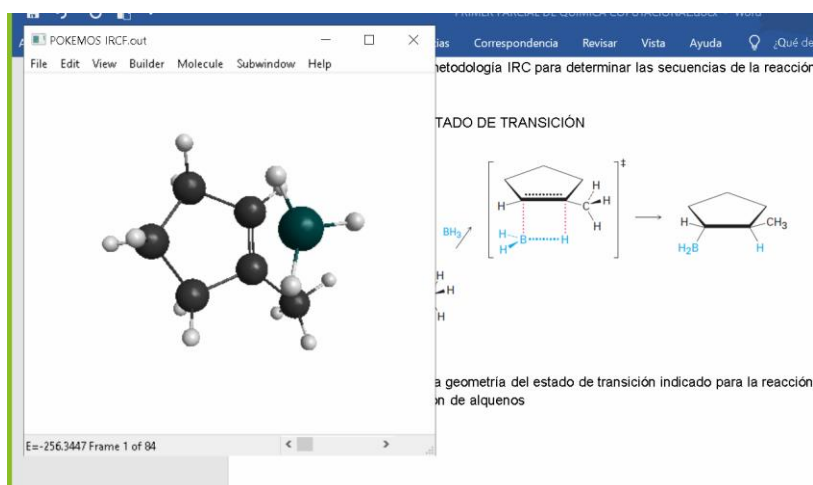


Salida del Avogadro

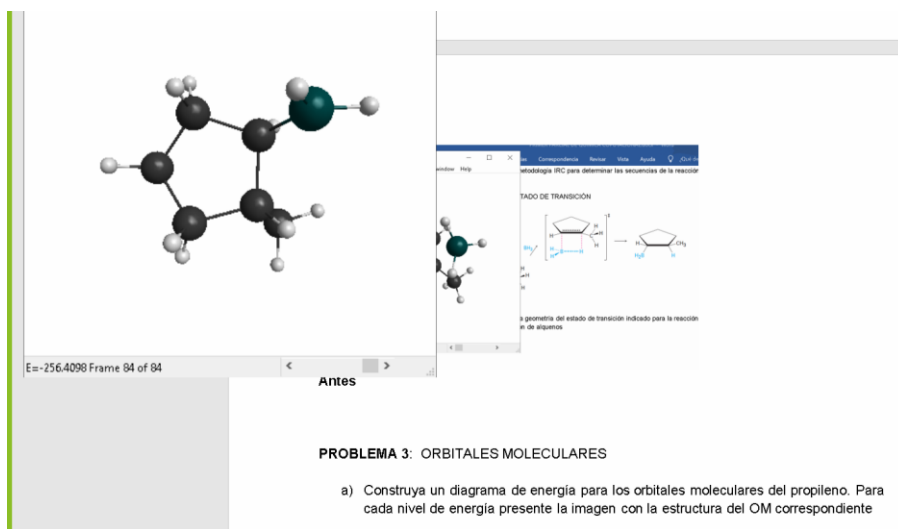




- a) Determine la geometría del estado de transición indicado para la reacción de hidroboración de alquenos



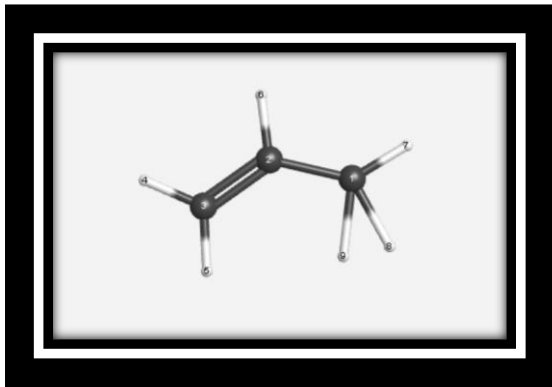
Antes



Después

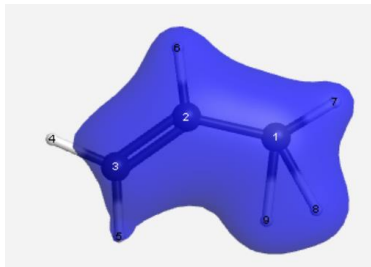
PROBLEMA 3: ORBITALES MOLECULARES

- a) Construya un diagrama de energía para los orbitales moleculares del propileno. Para cada nivel de energía presente la imagen con la estructura del OM correspondiente

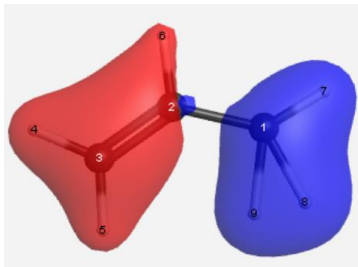


Propileno

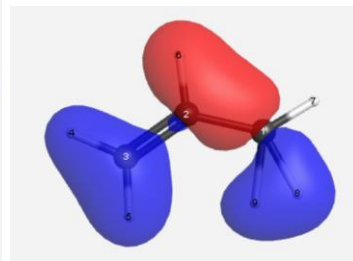
OM:



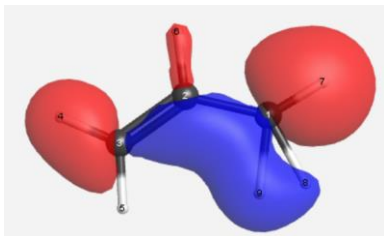
-1.07451



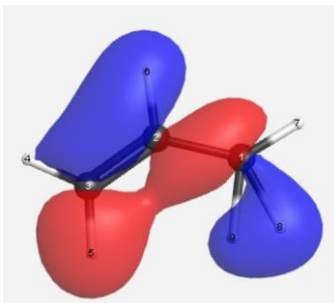
-0,94571



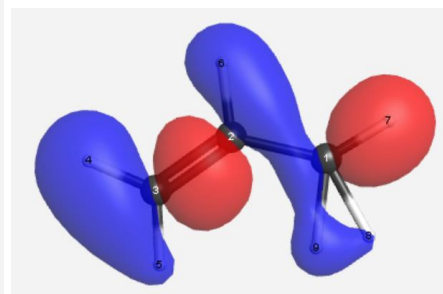
-0,79074



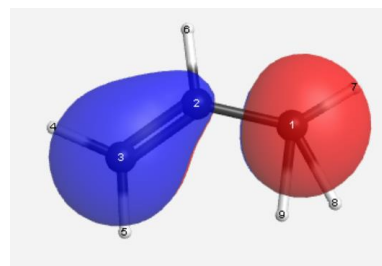
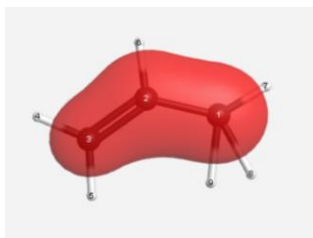
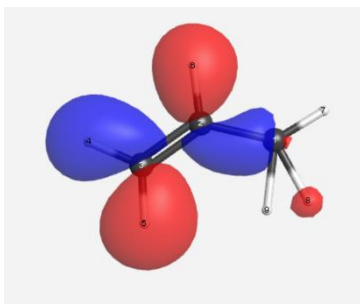
-0,66725



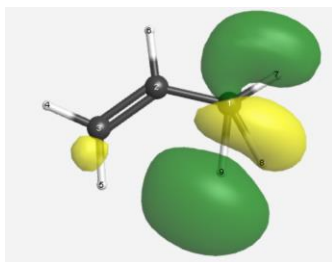
-0,62661



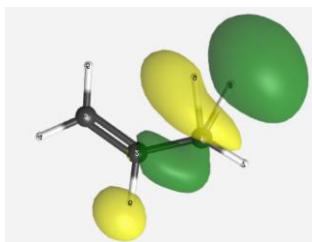
-0,56151



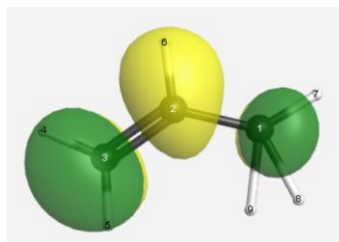
-0.48971



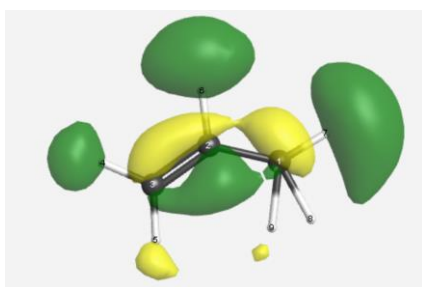
-0,43289



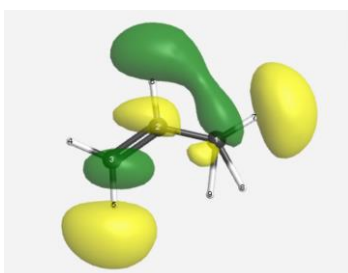
-0,25025



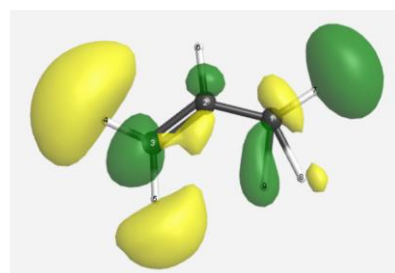
0.18447



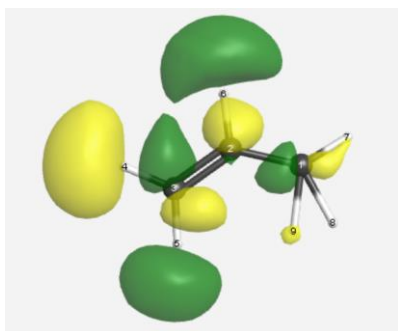
0.19263



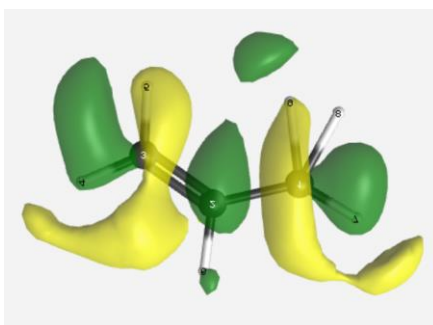
0.24177



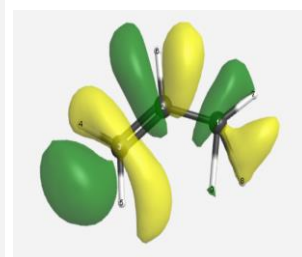
0.29884



0.35699



0.36321



0.42119

0.57526

0,61646

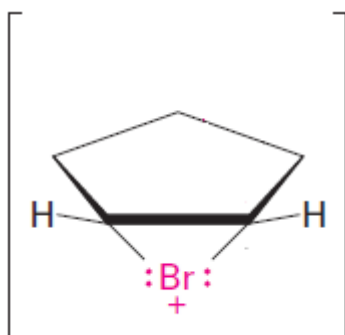
webmo.net/demoserver/cgi-bin/webmo/jobmgr.cgi

Instagram Mundial de Noticias YouTube Cortador de vídeo o... Nomenclatura de al... EasyPrompter Directorio de Tests... Otros marcadores Lista de lectura

Orbital	Simetría	Ocupación	Girar	Energía (au)	Comportamiento
				> -1.25025	
4	-	2	-	-1.07451	
5	-	2	-	-0.94571	
6	-	2	-	-0.79074	
7	-	2	-	-0.66725	
8	-	2	-	-0.62661	
9	-	2	-	-0.56151	
10	-	2	-	-0.48971	
11	-	2	-	-0.43289	
12	-	2	-	-0.25025	
13	-	0	-	0.18447	
14	-	0	-	0.19263	
15	-	0	-	0.24177	
dieciséis	-	0	-	0.29884	
17	-	0	-	0.35699	
18	-	0	-	0.36321	
19	-	0	-	0.42119	
20	-	0	-	0.57526	
21	-	0	-	0.61646	

melanie montes

PROBLEMA 4: IÓN BROMONIO



- a) Determine la estructura del ión bromonio indicado. Señale los ángulos correspondientes y distancia de enlaces C-Br

