

INSTRUÇÕES PARA ESTA TAREFA

Esta é uma tarefa avaliativa. Vocês terão que entregar os resultados até o dia 22 de outubro de 2021, por e-mail. Vocês devem fazer um relatório dos resultados, apresentando os dados obtidos na forma de imagens, tabelas e gráficos e os discutindo. Não é necessário enviar os arquivos que saem do programa.

Há um PDF com um artigo que servirá de base e também um arquivo .mol com a estrutura a ser tratada, que é diferente da do artigo. Leiam o artigo para ver os métodos, parâmetros e forma de analisar os dados.

A tarefa de vocês consiste em reproduzir os itens 2.1 e 2.2, obtendo os seguintes dados para discussão:

- 1) Potencial Eletrostático
- 2) HOMO-LUMO
- 3) Superfície eletrônica
- 4) Energia vibracional (IR)