

Cálculos de estructura electrónica para explicar conceptos básicos del grado en química

Pablo G. Jambrina*, Lola González-Sánchez, Alberto Martín Santa Daría, Anzhela Veselinova, Javier Hernández

Departamento de Química Física, Universidad de Salamanca, Salamanca,

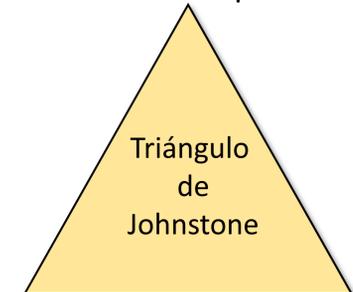
*pjambri@usal.es

INTRODUCCIÓN y OBJETIVOS

Uno de los problemas más habituales que nos encontramos en los actuales grados de química es la división de los conocimientos básicos en asignaturas impartidas por distintas áreas de conocimiento o departamentos que apenas se comunican entre sí. Así, pese a que las divisiones entre áreas de conocimiento son difusas, se puede transmitir la sensación de que la química es diferente en función de si la imparte un químico físico, un químico orgánico...

En este laboratorio de química computacional se propone explicar conceptos de otras áreas de conocimiento usando herramientas de la Química Cuántica.

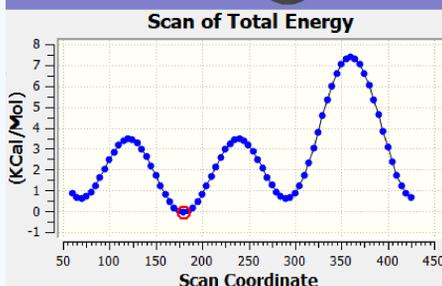
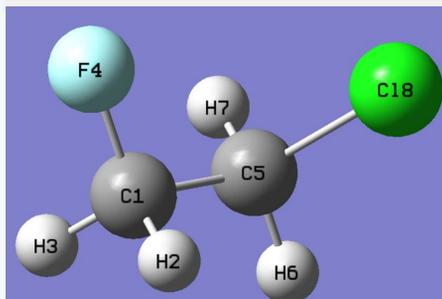
Macroscópico



Microscópico

Simbólico

Proyecciones de Newman



¿Qué estructura tenemos en los mínimos locales?
¿Y en los máximos?

Ampliación: Calcular el TS. ¿Cuál es la frecuencia imaginaria?

Camino y mecanismos de reacción

Se necesita modificar manualmente el fichero:

```
# opt=AddGIC b3lyp/6-31+g(d,p)
```

...

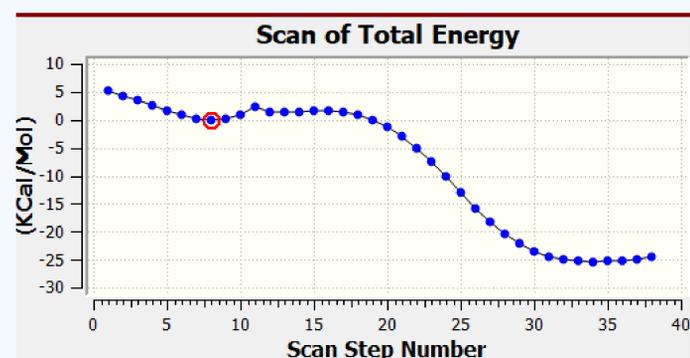
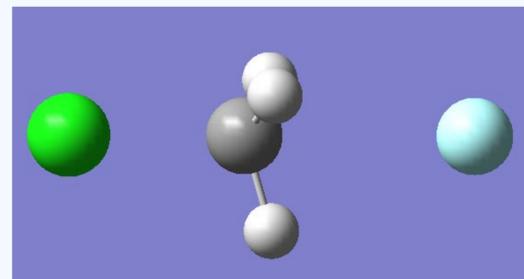
```
R15(Active)=B(1,5)
```

```
R16(Active)=B(1,6)
```

```
DeltaR=(R15-R16)
```

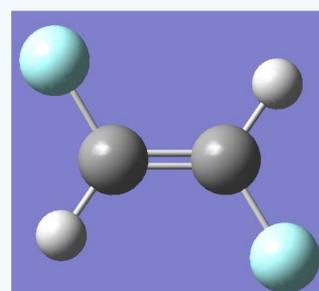
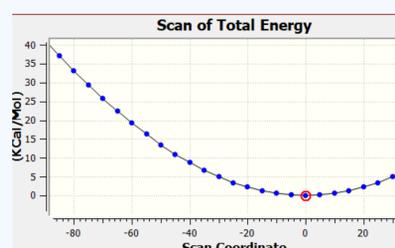
```
DeltaR(NSteps=40,StepSize=0.2)
```

Ampliación: Calcular el TS. ¿Cuál es la frecuencia imaginaria?



¿Rotación libre en enlaces C=C ?

¿Se puede pasar libremente de cis a trans? (comparamos con el caso anterior) ¿Cuál es más estable?



Duración: 2 x 4 horas

Software: Gaussian + Gaussview

Alternativas freeware: Avogadro, iqmol, orca...

