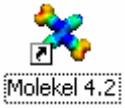
PRÁCTICO 11

Visualización de propiedades moleculares vinculadas con la estructura electrónica con el programa Molekel

1) Familiarización con el programa Molekel. Visualización de orbitales moleculares.

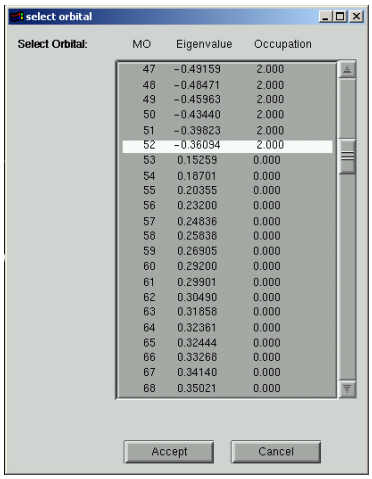
El programa Molekel es una poderosa herramienta que funciona sobre plataforma Windows y que permite diseñar, editar, visualizar y modelar estructuras moleculares. Para poder visualizar densidad electrónica, potenciales electrostáticos así como orbitales moleculares este programa requiere archivos con extensión **.out** generados con el programa Gaussian haciendo uso de los comandos adecuados.

Cargue el programa ya sea desde el menú Inicio *Inicio/Programas/Molekel* y/o desde el ícono del Escritorio.



Abra el archivo *C:\Mis documentos\Practico10\amadori.out*

Para poder visualizar los orbitales moleculares debe hacer un D-clic sobre la ventana elegir la opción Compute y luego Orbital. A continuación aparecerá el siguiente cuadro de diálogo:



Visualice el orbital HOMO de esta molécula de 104 electrones. A continuación le aparecerá un nuevo cuadro de diálogo donde guardará la información en un archivo con extensión **.macu**

Nota: El formato **.macu** es el formato interno del programa Molekel y solo puede visualizarse con este programa. Cuando se generan superficies muy grandes y costosas desde el punto de vista de los recursos computacionales, se suele almacenar en el disco duro las distintas superficies generadas en archivos **.macu** para una futura visualización.

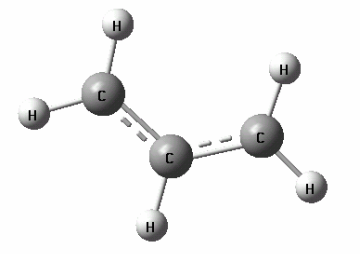
2) Comandos del Gaussian para generar un archivo .out con toda la información necesaria para el molekel.

Para que toda la información correspondiente a orbitales moleculares, densidad de carga, potenciales electrostáticos, etc. quede incluída en el archivo de salida del Gaussian se debe realizar un cálculo single-point sobre la estructura deseada haciendo uso de los siguientes comandos adicionales:

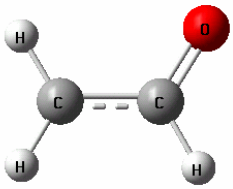
#P GFPrint PoP=FULL

Con la ayuda de la información estructural que se encuentra en el archivos .out de alguna de las siguientes tres moléculas optimizadas a nivel HF/6-31G(d) construya un

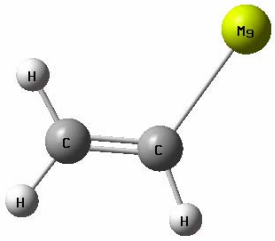
archivo de entrada para realizar un cálculo single-point (al mismo nivel) que incluya los comandos necesarios para el Molekel.



radical alilo
C:\Mis Documentos\Practico10\ralilo.out



radical oxígeno
C:\Mis Documentos\Practico10\roxigeno.out



radical magnesio
C:\Mis Documentos\Practico10\rmg.out

Analice el archivo de salida de este último cálculo en comparación con un archivo de salida convencional.

3) Visualización de superficies.

Cargue en el Molekel el archivo de salida generado con el cálculo single-point y proceda a visualizar las densidades electrónicas, los potenciales electrostáticos y las densidades de spin correspondientes.