

PRÁCTICO 2

Efecto del cambio del conjunto de base sobre la estructura y la energía

1) Evaluar el efecto del cambio de conjunto de base sobre la estructura al optimizar una molécula. La tabla que se muestra a continuación exhibe las distancias de enlace que son predichas por el método MP4 para la molécula de Fluoruro de hidrógeno (H-F). Haga correr el input `c:\g98w\curso\bases.gjf`, complete el cuadro con los datos del output y discuta los resultados.

NOTA: El método MP4 no posee derivadas analíticas.

Conjunto de base	Distancia de enlace (Å)
STO-3G	
3-21G	
4-31G	
6-31G(d)	0.935
6-31G(d,p)	0.921
6-31+G(d,p)	0.942
6-31++G(d,p)	0.926
6-311G(d,p)	0.913
6-311++G(d,p)	0.917
6-311G(3df,3pd)	0.914
6-311++G(3df,3pd)	0.917
Experimental	0.917

2) Evaluar el efecto del cambio de conjunto de base sobre la energía de la molécula de CH₄ optimizando al nivel HF/6-31G realizando una serie de single-point. Usar el archivo de input `c:\g98w\curso\metano.gjf` generando las entradas para los cálculos adicionales necesarios para realizar la serie de cálculos single-point. Completar el cuadro desplegada a continuación con los datos recolectados del output y discutir los resultados:

Conjunto de base	Energía (Hartrees)
6-31G/6-31G	
6-31G(d)/6-31G	
6-31+G(d)/6-31G	
6-31+G(d,p)/6-31G	
6-31++G(d,p)/6-31G	
6-31++G(2d,2p)/6-31G	
6-311G/6-31G	-40.18819
6-311G(d)/6-31G	-40.20263
6-311+G(d)/6-31G	-40.20276
6-311+G(d,p)/6-31G	-40.20907

6-311++G(d,p)/6-31G	-40.20914
6-311++G(2d,2p)/6-31G	-40.21216
CBS-Q	-40.40674

Sugerencia: examinar la tabla de resultados del ejercicio 5.4 del libro "Exploring chemistry with Electronic Structure Methods" segunda edición, por Foresman y Frisch.