

ANEXO PRÁCTICO COMPUTACIONAL N° 3

Parte C. Estudio del efecto del cambio de base sobre las propiedades moleculares

Conjunto de Base	Distancia H-H (Å)	Energía HOMO-LUMO (eV)
STO-3G	0.712	35.1
3-21G	0.735	23.4
6-31G*	0.730	22.9
6-31G**	0.733	22.8
6-311++G2d2p	0.736	18.1
Experimental	0.741	