

TALLERS D'ESTIU

Guia per a tallers computacionals d'estiu.

Material necessari= Ordinadors amb GaussView i Gaussian 09 funcionant correctament
Durada= aproximadament 1hora 30 minuts. Realitzar després de xerrada introductòria.

Metodologia

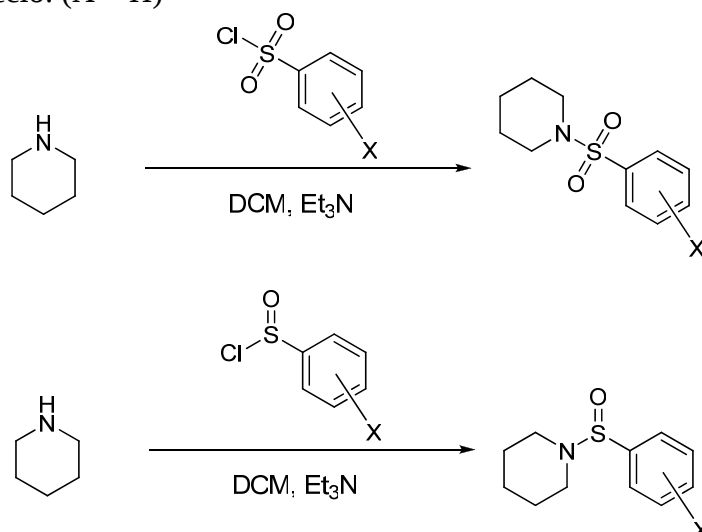
#p AM1 opt freq

Càlculs Semi-empírics, **AM1**. En fase gas. Optimitzacions i Freqüències **opt freq**

Activitat

Es pretén avaluar la termodinàmica de com a mínim una de les reaccions realitzades al laboratori

Estudi de la reacció: (X = H)



1.- Explicar com enviar un càlcul exemple, i. e. la piperidina. La piperidina hauria de ser en conformació cadira i equatorial.

- Ús del GaussView
 - o Com dibuixar molècules
 - o Com preparar càlcul (opcions menú)
 - o Com enviar càlcul (explicar una mica què fa l'ordinador)
- Anàlisi del fitxer de sortida
 - Canvi de geometria (optimització)
 - Energies
 - Freqüències
 - Densitat de càrrega sobre els àtoms

2.- Posteriorment els alumnes intentaran enviar sols el clorur de sulfonil benzè i els productes de la reacció.

3.- Els alumnes analitzaran els resultats de les noves molècules obtingudes.

4.- Explicar com calcular la diferència d'energia per saber si la reacció és exotèrmica o no, i els alumnes intentaran avaluar-ho.

5.- Els alumnes enviaran els càlculs per a l'altre sistema de reacció, el sulfinil.

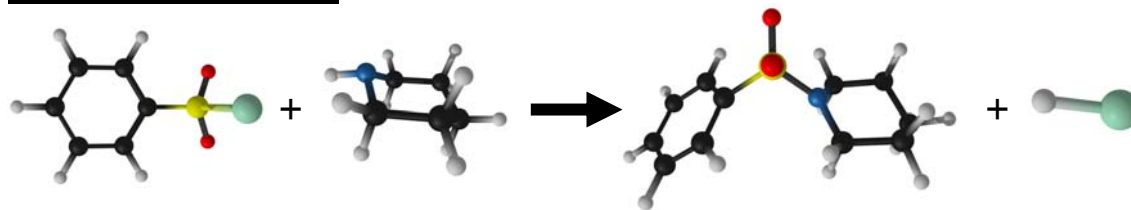
6.- En cas que hi hagués temps es podrien repetir els càlculs utilitzant un altre substituent X diferent de H.

Resultats

Els resultats que s'haurien d'obtenir es presenten a continuació:

*No s'ha fet una cerca conformacional d'aquestes espècies per tant podria ser que hi hagués algun isòmer més baix en energia. Els alumnes també podrien trobar isòmers més alts en energia i per tant resultats lleugerament diferents.

Clorur de sulfonyl benzè



Clorur de sulfonyl benzè
DE -0.641187389848E-01
DE(ZPE) 0.038067
DG 0.004522

16	-1.150744	-0.546816	0.000023
6	0.451044	-0.115892	0.000016
6	0.964120	1.186145	0.000036
6	1.367986	-1.185950	-0.000009
6	2.339041	1.417942	0.000031
1	0.280416	2.054769	0.000056
6	2.738626	-0.962308	-0.000014
1	0.988393	-2.223253	-0.000027
6	3.229354	0.346116	0.000006
1	2.717269	2.451803	0.000047
1	3.435478	-1.814331	-0.000034
1	4.315657	0.527437	0.000002
8	-1.509729	-1.176133	1.188167
8	-1.509699	-1.176275	-1.188056
17	-2.100642	1.320917	-0.000100

Piperidina
DE -0.305247464167E-01
DE(ZPE) 0.129948
DG 0.101081

6	1.443123	0.000023	0.259535
6	0.731301	-1.245167	-0.225319
6	-0.747347	-1.216187	0.159541
6	-0.747390	1.216164	0.159535
6	0.731261	1.245193	-0.225313
1	-1.274427	-2.074653	-0.344914
1	0.828951	-1.324309	-1.339287
1	1.199324	-2.157328	0.225500
1	1.478186	0.000020	1.380822
1	2.501131	0.000040	-0.110023
1	-1.274498	2.074608	-0.344929
1	-0.820767	1.381810	1.275982
1	0.828919	1.324346	-1.339280
1	1.199254	2.157366	0.225516
1	-0.820706	-1.381829	1.275989
7	-1.421190	-0.000025	-0.252442
1	-2.362727	-0.000041	0.093849

Producte sulfonyl
DE -0.830983894325E-01
DE(ZPE) 0.168928
DG 0.126364

6	3.748328	0.000092	-1.157681
6	3.172322	1.246420	-0.520135
6	1.642472	1.215322	-0.537317
6	1.642495	-1.215243	-0.537480
6	3.172346	-1.246319	-0.520270
1	1.254278	2.089103	0.062967
1	3.538688	1.335443	0.535505
1	3.510819	2.157182	-1.077650
1	3.516903	0.000150	-2.255540
1	4.863834	0.000099	-1.048546
1	1.254295	-2.089113	0.062665
1	1.297859	-1.339300	-1.606049
1	3.538695	-1.335441	0.535368
1	3.510871	-2.157017	-1.077869
1	1.297803	1.339537	-1.605855
7	1.079252	-0.000002	-0.004299
16	-0.078907	-0.000092	1.136897
6	-1.511789	-0.000027	0.236992
6	-2.127277	-1.203828	-0.126261
6	-2.127279	1.203835	-0.126051
6	-3.321560	-1.208068	-0.842539
1	-1.663673	-2.158966	0.178167
6	-3.321564	1.208202	-0.842324
1	-1.663662	2.158917	0.178536
6	-3.918785	0.000098	-1.204171
1	-3.794605	-2.162193	-1.118103
1	-3.794612	2.162375	-1.117711
1	-4.862753	0.000146	-1.770516
8	-0.024699	-1.203367	1.876649
8	-0.024707	1.203075	1.876825

HCl
DE -0.392239161945E-01
DE(ZPE) -0.033171
DG -0.051056

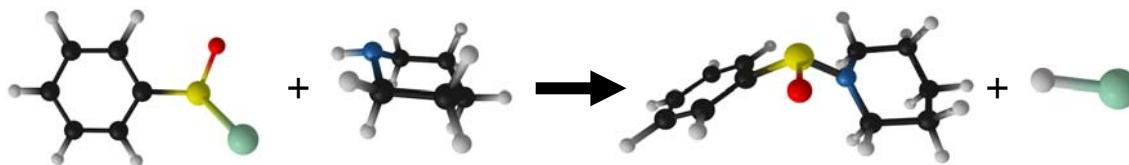
1	0.000000	0.000000	-1.212507
17	0.000000	0.000000	0.071324

Termodinàmica de la reacció:

$$\Delta E = -5.5 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta G = -5.8 \text{ kcal/mol}$$

Clorur de sulfinil benzè



Clorur de sulfinil benzè
DE -0.377573635559E-01
DE(ZPE) 0.060175
DG 0.025502

16	1.307384	0.326350	-0.618623
6	-0.328735	0.125880	-0.232124
6	-0.952654	-1.089254	-0.545288
6	-1.093958	1.157678	0.323490
6	-2.315441	-1.263440	-0.322760
1	-0.357797	-1.917649	-0.963995
6	-2.459141	0.988066	0.546116
1	-0.601364	2.112190	0.583476
6	-3.070753	-0.223126	0.223179
1	-2.795990	-2.221105	-0.572135
1	-3.050710	1.807692	0.980549
1	-4.148140	-0.361580	0.401821
8	1.671620	1.689742	-0.218346
17	2.234528	-0.960819	0.662314

Producte sulfinil

6	-3.785674	0.744449	0.667981
6	-3.161948	1.240285	-0.619336
6	-1.634052	1.160761	-0.553461
6	-1.750389	-0.677815	1.038359
6	-3.280326	-0.640318	1.013152

1	-1.212410	1.402530	-1.571895
1	-3.537621	0.628251	-1.479776
1	-3.452126	2.306270	-0.803990
1	-3.535081	1.452686	1.501273
1	-4.901573	0.726968	0.564754
1	-1.410919	-1.749015	1.144617
1	-1.398134	-0.105051	1.946690
1	-3.665472	-1.380425	0.264742
1	-3.657078	-0.947296	2.022314
1	-1.271584	1.954274	0.166057
7	-1.138935	-0.123447	-0.139703
16	0.092580	-0.795210	-0.965053
6	1.538932	-0.152362	-0.276718
6	1.790401	1.220902	-0.345237
6	2.516015	-0.992020	0.264609
6	2.998818	1.747062	0.105595
1	1.022726	1.897202	-0.755263
6	3.730024	-0.473148	0.713640
1	2.313953	-2.076241	0.333157
6	3.972163	0.897732	0.634455
1	3.185707	2.829037	0.046460
1	4.493036	-1.145082	1.133184
1	4.927812	1.310846	0.990207
8	0.123281	-2.246330	-0.617751

Termodinàmica de la reacció:

$$\Delta E = 5.2 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta G = 5.2 \text{ kcal/mol}$$

* Els resultats a nivell AM1 surten semblants al que s'obtenen en fase gas amb mètodes DFT (El producte del sulfinil es trobaria 6.5 kcal/mol per sobre de reactius i el producte del sulfonil 3.2 kcal/mol per sota en energia lliure).