

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 scrf=(solvent=dichloromethane)

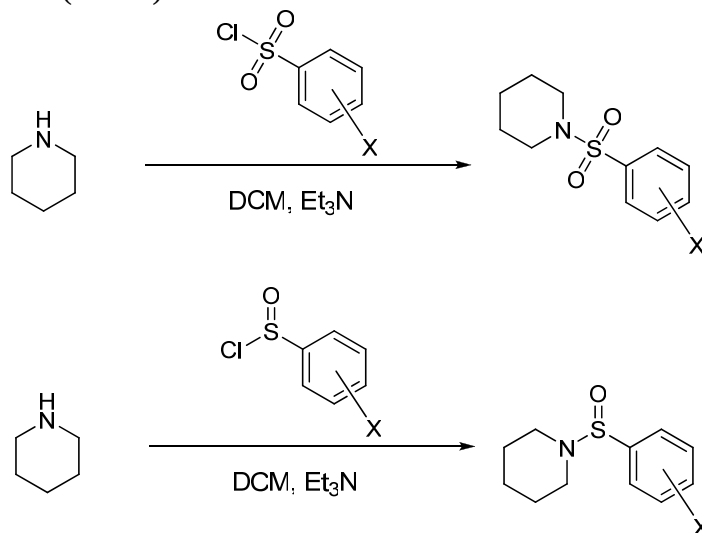
Càlculs Semi-empírics, AM1. En solució SCRF=(solvent=dichloromethane).

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 evaluar-ho.

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

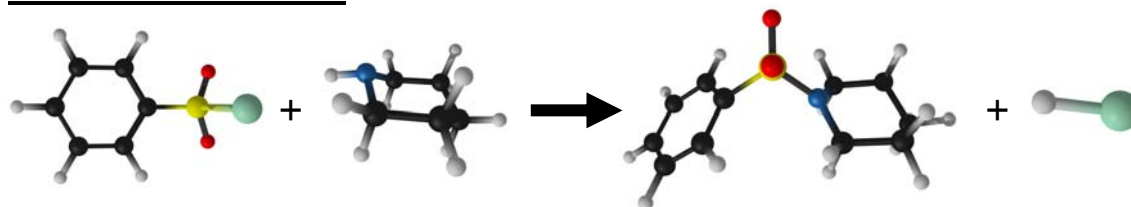
6.- En cas que hi hagués temps es podrien repetir els càlculs utilitzant un altre substituent X diferent de H.

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

E -0.827602199411E-01

E(ZPE) 0.019016

G -0.016293

16	-1.173332	0.000807	-0.533918
6	0.421778	0.000342	-0.228102
6	1.135306	-1.207359	-0.108584
6	1.135541	1.207628	-0.106150
6	2.505893	-1.209497	0.119590
1	0.593783	-2.166218	-0.204905
6	2.506107	1.209062	0.122123
1	0.594247	2.166835	-0.200252
6	3.195353	-0.000382	0.237264
1	3.046371	-2.165333	0.208068
1	3.046680	2.164643	0.212622
1	4.282554	-0.000664	0.420722
8	-1.638901	-1.191965	-1.081545
8	-1.638938	1.194938	-1.078393
17	-1.880441	-0.002043	1.480534

Piperidina

E -0.331790811079E-01

E(ZPE) 0.127186

G 0.098268

6	1.443221	0.000021	0.259375
6	0.731866	-1.245580	-0.224726
6	-0.747000	-1.215976	0.158230
6	-0.747040	1.215955	0.158227
6	0.731831	1.245603	-0.224722
1	-1.273713	-2.076523	-0.343151
1	0.834926	-1.329511	-1.337686
1	1.198395	-2.157132	0.229445
1	1.477517	0.000019	1.380787
1	2.501562	0.000036	-0.109345
1	-1.273779	2.076483	-0.343161
1	-0.821575	1.378409	1.274450
1	0.834896	1.329540	-1.337682
1	1.198335	2.157166	0.229454
1	-0.821521	-1.378428	1.274454
7	-1.424644	-0.000022	-0.255383
1	-2.359804	-0.000037	0.111805

Producte sulfonyl

E -0.952817865294E-01

E(ZPE) 0.156236

G 0.114197

6	-3.753456	0.675257	-0.927669
6	-3.216106	-0.730961	-1.086196
6	-1.686678	-0.733879	-1.122435
6	-1.603179	1.304334	0.201314
6	-3.130332	1.360212	0.269827
1	-1.323779	-1.801924	-1.112227
1	-3.579260	-1.372681	-0.242060
1	-3.587802	-1.181725	-2.042309
1	-3.531393	1.267019	-1.854751
1	-4.867411	0.643141	-0.807480
1	-1.179329	1.704796	1.167421
1	-1.259720	1.976060	-0.639221
1	-3.488024	0.873166	1.213792
1	-3.438368	2.437010	0.303360
1	-1.352041	-0.258002	-2.090408
7	-1.079658	-0.023074	-0.021540
16	0.080655	-0.663202	0.901476
6	1.508535	-0.135618	0.188116
6	2.027792	1.132544	0.482776
6	2.224532	-0.963969	-0.686222
6	3.224895	1.564446	-0.080780
1	1.482144	1.792006	1.180521
6	3.423125	-0.539195	-1.253478
1	1.834696	-1.970991	-0.918731
6	3.924420	0.727963	-0.952578
1	3.618919	2.563167	0.162384
1	3.973586	-1.203733	-1.937044
1	4.871922	1.067133	-1.400851
8	0.015226	-0.132918	2.218800
8	0.038736	-2.083143	0.849789

HCl

E -460.797999833

E(ZPE) -460.791345

G -460.809239

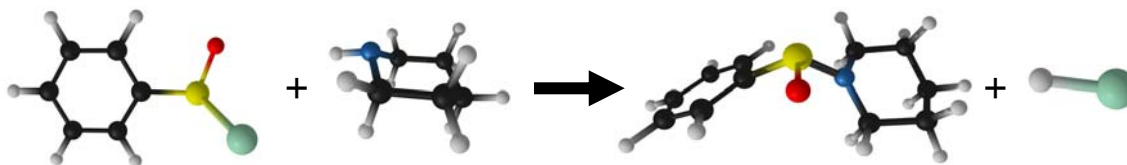
1	0.000000	0.000000	-1.218765
17	0.000000	0.000000	0.071692

Termodinàmica de la reacció:

$$\Delta E = -13.2 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta G = -13.4 \text{ kcal/mol}$$

Clorur de sulfinil benzè



Clorur de sulfinil benzè

E -0.487729438073E-01

E(ZPE) 0.048907

G 0.014310

16	1.298967	0.326052	-0.642633
6	-0.324957	0.131256	-0.234845
6	-0.950998	-1.082622	-0.555274
6	-1.092412	1.158126	0.329838
6	-2.312196	-1.260447	-0.325661
1	-0.359830	-1.905540	-0.991355
6	-2.455678	0.985934	0.556781
1	-0.605509	2.113870	0.591964
6	-3.067216	-0.225075	0.229707
1	-2.792586	-2.217518	-0.581132
1	-3.048013	1.803837	0.994972
1	-4.144904	-0.365107	0.410287
8	1.681417	1.675524	-0.210575
17	2.231575	-0.958446	0.678748

Producte sulfinil

E -0.421949463431E-01

E(ZPE) 0.205056

G 0.164336

6	3.777540	-0.741143	0.676007
6	3.188592	-1.186541	-0.645424
6	1.659298	-1.133946	-0.611198

6	1.713157	0.631376	1.067521
6	3.243449	0.617975	1.074866
1	1.263841	-1.334052	-1.648876
1	3.573623	-0.532865	-1.470307
1	3.497937	-2.239411	-0.871229
1	3.522115	-1.490895	1.470676
1	4.894966	-0.701335	0.597932
1	1.355778	1.690164	1.219377
1	1.351112	0.012337	1.941019
1	3.634541	1.398602	0.372224
1	3.592124	0.882634	2.106058
1	1.293837	-1.963603	0.064396
7	1.133435	0.123875	-0.147242
16	-0.093055	0.797972	-0.972521
6	-1.535968	0.158995	-0.276344
6	-1.774034	-1.217742	-0.341859
6	-2.524956	0.989578	0.257393
6	-2.978337	-1.753953	0.109341
1	-1.000580	-1.888457	-0.752503
6	-3.734319	0.460939	0.706581
1	-2.340550	2.075976	0.319688
6	-3.961710	-0.913324	0.633448
1	-3.153894	-2.838738	0.052336
1	-4.506254	1.127101	1.120354
1	-4.914522	-1.334695	0.989244
8	-0.118189	2.253659	-0.602668

Termodinàmica de la reacció:

$$\Delta E = -1.2 \text{ kcal/mol}$$

$$\Delta G = -1.1 \text{ kcal/mol}$$

* Els resultats a nivell AM1 surten més exotèrmics del que surten amb mètodes DFT (El producte del sulfinil es trobaria unes 5 kcal/mol per sobre de reactius i el producte del sulfonil unes 5 kcal/mol per sota).