

TALLERS D'ESTIU 2012

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.

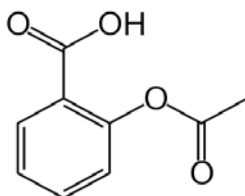
Metodologia

#p AM1 opt freq

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

Activitat

Es pretén avaluar dibuixar i calcular l'àcid acetilsalicílic, i calcular l'energia de la reacció de la seva síntesis.



1.- Explicar com enviar un càlcul exemple, i. e. una molècula d'aigua o etanol.

- Ús del GaussView

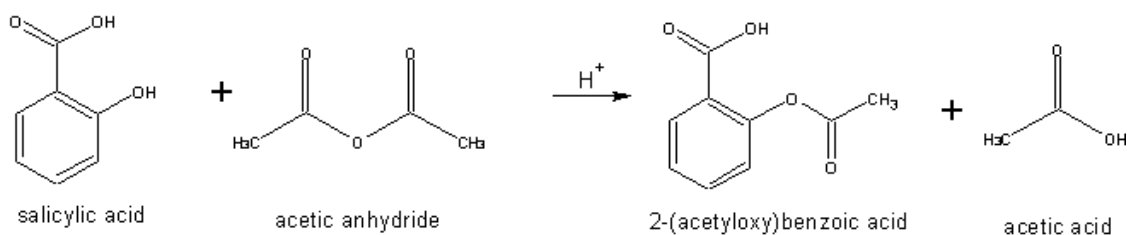
- oCom dibuixar molècules
- oCom preparar càlcul (opcions menú)
- oCom enviar càlcul (explicar una mica què fa l'ordinador)

- Anàlisi del fitxer de sortida

- Canvi de geometria (optimització)
- Energies
- Freqüències
- Densitat de càrrega sobre els àtoms

2.- Posteriorment els alumnes intentaran preparar i enviar sols els càlculs de l'aspirina, l'àcid salicílic, l'anhídric acètic, i l'àcid acètic.

3.- Els alumnes analitzaran els resultats de les quatre molècules calculades.



4.- Es calcularà la termodinàmica de la reacció (diferència entre reactius i productes). Es buscarà quin grup ha aconseguit el millor isòmer (l'energia més baixa per cada molècula).

5.- Es mostrarà l'estructura cristal·lina de l'àcid acetilsalicílic.

6.- El temps restant, els alumnes intentaran dibuixar i calcular l'energia de diferents nanoputians.