

PRÀCTICA 8: ESTUDI DE SISTEMES ELECTRÒNICS AMB EL MÈTODE DE HÜCKEL

Objectius. L'objectiu de la pràctica és familiaritzar l'alumne amb el model d'orbitals moleculars construïts com a combinació lineal d'orbitals atòmics (OM-CLOA). S'utilitzarà el mètode d'OM més simple de tots, el mètode de Hückel, que va ser proposat per E. Hückel el 1931. La simplicitat del model utilitzat converteix aquest mètode en una ferramenta excel·lent per a il·lustrar conceptes químic-quàntics d'estructura molecular com ara ordres d'enllaç, densitats electròniques i energies orbitals. Els exercicis proposats mostraran com utilitzar aquests conceptes per a predir propietats moleculars com ara distàncies d'enllaç, capacitat donadora i/o acceptora d'electrons, reactivitat, etc. Cal destacar que, malgrat la seua antiguitat, el mètode de Hückel continua sent utilitzat en investigació i que el seu coneixement és part del currículum de qualsevol estudiant de química orgànica o inorgànica.

La concepció de la pràctica és totalment interactiva, no solament amb l'ordinador, sinó també amb els professors. És molt important que es compreguen tots els conceptes. No us limiteu a veure passar els resultats sobre la pantalla de l'ordinador, discutiu els resultats en profunditat amb els vostres companys i pregunteu tot el que no entengueu al professor.

Actualització: 2019-2020

Part I. Estudi de sistemes electrònics amb el mètode de Hückel

1. Programa Hückel

El programa Hückel representa en mode gràfic o per mitjà de taules els orbitals moleculars, les seues energies i propietats relacionades (densitat electrònica, ordres d'enllaç, etc.) calculats per a hidrocarburs conjugats utilitzant el mètode de Hückel. El programa pot ser executat tantes voltes com siga necessari. Preneu nota de tots els resultats que obtingueu i que considereu significatius.

1.1. Procediment de posada en marxa del programa

a) Enceneu l'ordinador.

b) Polseu la icona del programa Internet Explorer que apareix en l'escriptori.

c) Obriu des del programa el fitxer LaboratorioQF2/Huckel/SHMo2.htm

1.2. Definició d'una molècula

- Per a crear un àtom, només cal polsar **Add** (ferramentes d'edició) i després el botó esquerre del ratolí en qualsevol posició de la finestra. Per a esborrar un àtom preneu **Erase** i després feu clic damunt de l'àtom a esborrar. El botó **Clear** esborra tots els àtoms creats fins al moment. Per defecte l'àtom creat és de Carboni. Es pot canviar prement **Change** i fent clic damunt de l'àtom que es vol canviar. Una vegada definits dos àtoms per aquest procediment, cal definir d'interacció p entre ells. Seleccioneu el primer àtom fent clic damunt d'ell i arrossegant el ratolí fins al segon àtom. Apareixerà un enllaç entre ells, que indica que els orbitals p d'aquests àtoms poden interaccionar per a donar un enllaç de tipus p.

- La resta de ferramentes d'edició compleixen una funció merament estètica, ja que el mètode de Hückel no té en compte la geometria molecular. El botó **Rotate** permet girar la molècula, **Move**, desplaçar un àtom i **Minimize** redibuixa la molècula en format estàndard (per exemple, si dibuixem un hexàgon irregular per a representar el benzè, la funció **Minimize** el converteix en regular).

- El programa assigna automàticament un electró per cada àtom. El nombre d'electrons pi d'un hidrocarbur conjugat neutre és el mateix que el nombre d'àtoms de carboni. Per a canviar el nombre d'electrons, si fos necessari, es disposa dels botons + i – que apareixen baix a l'esquerra.

- El programa mostra a la dreta el diagrama d'orbitals en funció de l'energia (en unitats beta). Els botons Show Orbitals, Up i Down, permeten mostrar, damunt l'esquelet de la molècula, la composició de cada orbital molecular. La grandària de l'orbital atòmic és funció del mòdul del coeficient de participació en l'OM i el color és funció del signe.

- La informació més detallada sobre els coeficients de l'OM, les poblacions electròniques i els ordres d'enllaç són accessibles polsant el botó **Show Data Table**.

2. Estudi de sistemes

Exercici 1: La molècula d'etilè

Familiaritzeu-vos amb les diferents opcions del programa i estudeu els resultats: energies orbitals, composició dels orbitals, densitats electròniques i ordres d'enllaç.

És important que compregueu el significat físic de cada una de les representacions i de les magnituds que proporciona el programa.

Exercici 2: Polièns lineals

a) Energia de deslocalització.

- Construïu una cadena lineal de 4 àtoms de carboni simulant la molècula d'1,3-butadiè. Definiu únicament els dos enllaços laterals, de manera que obtingueu dos etilens independents. Calculeu els OM d'aquest sistema i anoteu l'energia electrònica total.
- Construïu de nou la cadena de 4 àtoms, però ara definiu també l'enllaç central. Compareu l'OM, les seues energies i l'energia electrònica total amb els del cas anterior.

b) Influència de la feometria.

- Calculeu els OM del s-cis-1,3-butadiè i s-trans-1,3-butadiè. De quina manera influeix la geometria en els resultats?

c) Ordre d'enllaç i longitud d'enllaç.

- Construeix cadenes lineals de 6 (1,3,5-hexatriè) i 8 (1,3,5,7-octatetraè) àtoms de carboni completament conjugats. Compareu els ordres d'enllaç amb els obtinguts per a l'etilè i l'1,3-butadiè.

d) Propietats dels orbitals moleculars.

- Analitzeu la composició dels OM (caràcter enllaçant/antienllaçant i propietats nodals) del butadiè i hexatriè.

e) Energia dels orbitals moleculars.

- Construïu un diagrama representant l'evolució de l'energia de l'OM ocupat més alt en energia (HOMO) i de l'OM desocupat més baix en energia (LUMO) en funció de la longitud del poliè. Discutiu, a partir d'aquest diagrama, l'evolució de les propietats redox i les propietats òptiques amb la longitud del poliè.

Exercici 3: Polièns cíclics. Anulens

a) Benzè. Aromaticitat.

- Construïu un sistema de 6 àtoms de carboni totalment conjugats, formant un hexàgon regular. Calculeu la seua energia de deslocalització i compareu-la amb la de l'1,3,5-hexatriè.
- Analitzeu el diagrama d'energies orbitals i la composició i propietats nodals dels OM.

b) Ciclobutadiè. Antiaromaticitat.

- Construïu un sistema de 4 àtoms de carboni totalment conjugats formant un quadrat. Calculeu la seua energia de deslocalització i compareu-la amb la de l'1,3-butadiè.
- Analitzeu l'energia i composició dels OM.

- Construïu un diagrama de correlació orbital en què es represente l'evolució energètica dels OM quan la molècula passa d'una geometria quadrada a una geometria rectangular.

- En funció de la informació obtinguda, discutiu l'estabilitat de la molècula de ciclobutadiè i prediguen la seua geometria.

c) Ciclooctatetraè

- Construïu cicles de major grandària (8, 10... àtoms) i analitzeu la seua energia de deslocalització.

Exercici 4: Sistemes cíclics no alternants

a) Ciclopropenil i ciclopentadienil.

- Calculeu els OM dels radicals ciclopropenil i ciclopentadienil. Analitzeu la seua estabilitat i la possible formació d'espècies aniòniques i/o catióniques.

b) Sistemes bicíclics.

- Calculeu els OM de les molècules resultants d'unir dos cicles de 3 àtoms de carboni (triafulvalè) i de 5 àtoms (fulvalè), i la resultant d'unir un cicle de 3 amb un de 5 àtoms.

- Analitzeu les densitats electròniques i els ordres d'enllaç. Dibuixeu l'estructura geomètrica.

- Discutiu l'estabilitat del sistema i la seua capacitat donadora/acceptora d'electrons.

- Prediguen, en funció de la composició dels OM, l'efecte que tindria sobre l'estructura geomètrica l'addició o subtracció d'electrons depenent si la molècula té tendència a formar anions o cations, respectivament. Comproveu aquest efecte calculant el respectiu ió.

Exercici 5: Sistemes policíclics. Reactivitat

a) Sistemes alternants. Naftalè.

- Disposeu 10 àtoms de carboni formant dos hexàgons aproximadament regulars compartint un costat. Calculeu els seus OM i analitzeu els seus ordres d'enllaç.

- Estudieu amb detall les densitats electròniques i la composició de l'HOMO i el LUMO. En quina posició tindrà lloc preferentment la substitució electròfila? I la substitució nucleòfila?

b) Sistemes no alternants. Azulè.

- Disposeu ara 10 àtoms de carboni formant un cicle de 7 i un altre de 5 àtoms compartint un costat. Calculeu els seus OM i discutiu les mateixes propietats que per al naftalè.

Exercici 6: Reactivitat amb Heteroàtoms

a) Sistemes aromàtics amb un nitrogen: Piridina.

- Disposeu ara 6 àtoms de carboni formant un cicle i canvieu un d'ells per nitrogen per construir la piridina. Predigieu les posicions d'atac preferents per a nucleòfils i electròfils.
- Lleveu un electró per tal d'obtenir l'ió piridini. Predigieu les posicions preferents d'atac.

b) Nitrobenzè.

- Disposeu ara 6 àtoms de carboni formant un cicle i afegiu un grup NO_2 . Analitzeu la reactivitat del nitrobenzè enfront d'electròfils. Quines posicions (orto, meta o para) resulten activades pel grup nitro?

Part II. Modelització molecular: estructura i reactivitat

Objectius. Familiaritzar-se amb els següents conceptes: superfície de potencial, mínim local, mínim global, punt de cadira, barrera de potencial, optimització de la geometria, coordenades internes, camp de forces, mecànica molecular.

1. Introducció

L'aparició en les últimes dècades d'ordinadors més potents i més barats ha permès el desenvolupament i la popularització de noves ferramentes teòriques amb la finalitat de determinar propietats moleculars.

2. Experiments

Experiment 1

Localitzeu els mínims conformacionals de les següents molècules. Dibuixeu cada molècula. En el menú MM2 seleccioneu l'opció *Minimize Energy* i polseu el botó *RUN*. Anoteu l'energia de cadascun dels mínims que obtingueu i indiqueu quins són mínims locals i mínims globals. Tingueu en compte que per a localitzar els mínims és necessari que l'estructura de partida siga la més propera possible al mínim que desitgem obtenir.

a) $\text{ICH}_2 - \text{CH}_2\text{Cl}$. En aquest cas existeixen diversos conformers deguts al gir al voltant de l'enllaç central C-C. El programa dibuixa automàticament un d'aquests conformers. Quin? Minimitzeu-lo i apunteu la seua energia. Per a trobar altres conformers aneu al menú *Structure*, submenú *Measurements* i escolliu l'opció *Generate All Dihedral Angles*. Apareixerà una taula amb els angles dièdres. Modifiqueu en aquesta finestra el valor del dièdre corresponent al gir al voltant del C-C central i torneu a minimitzar, anotant l'energia. Repetiu el procediment per a tants mínims com penseu que puguem existir.

b) Ciclohexà. El programa crea automàticament un dels conformers possibles. Minimitzeu i apunteu l'energia. Per obtenir l'altre cal deformar l'estructura a mà, seleccionant un o diversos àtoms i desplaçant-los apropiadament. Després de minimitzar comproveu que té la conformació desitjada i apunteu l'energia. Compareu la diferència amb dades bibliogràfiques.

Experiment 2

Fent ús del mètode MM2, obtingueu la variació de l'energia en funció del gir de la molècula al voltant de l'enllaç C-C de les següents molècules. Dibuixeu cada molècula i seleccioneu els 4 àtoms que defineixen l'angle diedre. Assegureu-vos que en el menú *File*, submenú *Preferences*, en la pestanya *Dihedral Driver* apareixen marcats *Enable Minimization* i una resolució de 5°. D'aquesta forma l'angle diedre anirà variant cada 5° i l'energia s'obtindrà minimitzant la resta de graus de llibertat. Aneu al menú *Calculations*, submenú *Dihedral Driver* i escolliu l'opció *Single Dihedral Plot*. Apareixerà un gràfic amb la superfície d'energia potencial. Picant sobre la corba podeu observar els diferents conformers. Amb el botó dret del ratolí podeu accedir a un menú per a copiar el gràfic i les dades.

Enganxeu els resultats en un full Excel.

- a) $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$.
- b) $\text{CH}_3 - \text{CH}_2\text{I}$.
- c) $\text{ICH}_2 - \text{CH}_2\text{I}$.

Representeu conjuntament els resultats de les tres molècules i discutiu les diferències.

Experiment 3. Estudi de superfícies d'energia potencial obtinguda a través de la mecànica quàntica: rotació al voltant d'un enllaç

Com a exemple de l'estudi d'una superfície d'energia potencial, estudiarem la rotació de la molècula de fluorometanol. L'estabilitat de les diferents conformacions obtingudes en girar al voltant d'aquest enllaç serà determinada per diversos factors:

- La interacció entre els dipols d'enllaç C-F i O-H.

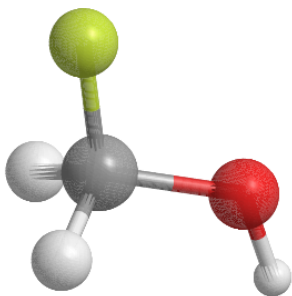


Figura 1: Molècula de fluorometanol.

- Hiperconjugació entre els orbitals solitaris de l'oxigen i el LUMO (orbital antienllaçant C-F).

- Repulsió estèrica entre els àtoms quan els enllaços es troben eclipsats.

La suma d'aquests tres factors determinarà la forma de la superfície d'energia potencial al llarg de la coordenada de rotació de l'enllaç. Lògicament, la mecànica molecular no és capaç de reproduir adequadament el segon dels efectes. Per a estudiar la superfície intentarem caracteritzar els mínims (mínims d'energia) i els màxims (estats de transició entre dos mínims) que presenta.

Realització:

a) Preparació

- Dibuixeu la molècula de metanol.
- Reemplaceu un dels hidrògens del carboni per fluor.
- Obteniu la corba de rotació clàssica utilitzant l'opció *Dihedral Driver*.

b) *Localització dels punts estacionaris utilitzant mecànica quàntica.* Calcularem ara la superfície d'energia potencial resolent l'equació de Schrödinger electrònica. Aquesta equació pot resoldre's usant diverses aproximacions. En concret nosaltres utilitzarem un mètode semiempíric, l'AM1, en què algunes de les integrals electròniques necessàries per a resoldre la funció d'ona se substitueixen per valors parametritzats per a reproduir resultats experimentals. Açò fa que els mètodes semiempírics resulten molt ràpids computacionalment, encara que el seu defecte és que no sempre produeixen resultats de la qualitat esperada. Per a localitzar diferents punts estacionaris hem de començar la recerca en les proximitats del conformer desitjat. Seleccionem els quatre àtoms (FC- O- H) que defineixen l'angle diedre i a continuació seleccionem l'opció *Display Dihedral Measurements* del submenú *Measurements* en el menú *Structure*. Apareixerà una finestra amb el valor de l'angle diedre. Aquest valor el podem modificar, adoptant aleshores la molècula el valor del diedre que li posem.

- Seleccionem un valor d'angle diedre proper a 0° . A continuació, en el menú *Calculations* anem al submenú *MOPAC Interface* (El programa MOPAC és un programa de càlcul amb mètodes semiempírics). Escollim l'opció *Minimize* per a intentar localitzar un mínim. Anoteu el resultat de l'angle final i la seua energia. A continuació repetim el procés escollint l'opció *Optimize to Transition State*. Anoteu el valor de l'angle i l'energia (si no apareix un resultat de l'energia, això indica que el càlcul no ha convergit, és a dir, que el programa no ha sigut capaç de trobar un punt estacionari a partir de l'estructura proposta. Açò sol ocórrer quan es busca una estructura de transició partint lluny de la zona del màxim).
- Repetiu el procés anterior seleccionant un valor del diedre prop de 60° .
- Repetiu el procés anterior seleccionant un valor del diedre prop de 120° .
- Repetiu el procés anterior seleccionant un valor del diedre prop de 180° .

Tenint en compte la naturalesa (mínim/estructura de transició) i el valor de l'energia representeu la superfície d'energia potencial. Compareu-la amb l'obtinguda mitjançant mecànica molecular (apartat a) i comenteu les diferències.

Experiment 4. Reacció de substitució nucleòfila bimolecular SN₂

Les reaccions SN₂ són aquelles que segueixen el següent esquema reactiu:

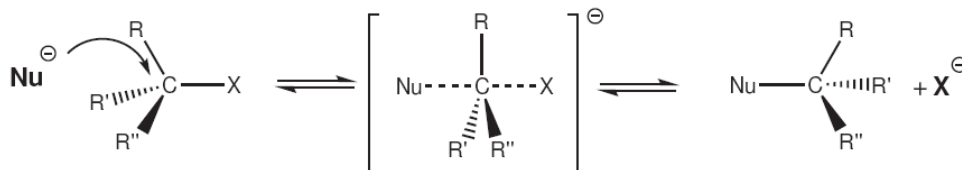


Figura 2: Mecanisme de reacció SN₂.

on **Nu** representa al nucleòfil i **X** al nucleòfug. La molècula que sofreix l'atac s'anomena electròfil. L'estructura entre claudàtors representa l'estat de transició (TS). Aquest tipus de reaccions són molt comuns en el camp de la química orgànica i han sigut objecte de nombrosos estudis. En aquesta pràctica anem a estudiar dos tipus de reaccions SN₂:

- **Tipus I:** el nucleòfil està carregat negativament. En l'estat de transició, la càrrega es reparteix entre el nucleòfil i el nucleòfug, amb la qual cosa presenta un moment dipolar baix i els productes tornen a presentar la càrrega localitzada.
- **Tipus II:** tant nucleòfil com electròfil són elèctricament neutres. Els productes estan carregats i l'estat de transició presenta un moment dipolar alt.

En aquest apartat estudiarem una reacció SN₂ de cada tipus. Localitzarem els mínims i l'estat de transició de cadascuna i en calcularem les propietats.

a) **Tipus I.** Com a reacció de tipus I estudiarem la reacció de substitució nucleòfila entre un anió clorur i el clorur de metil:

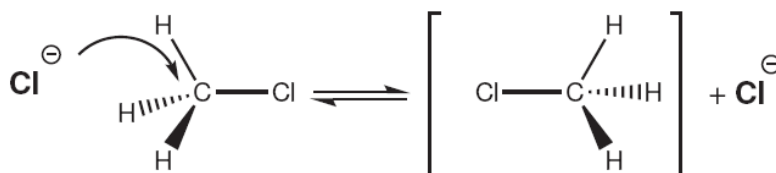


Figura 3: Mecanisme de reacció SN₂ de tipus I.

Aquesta reacció presenta la característica de ser simètrica, és a dir, que reactius i productes són químicament idèntics.

Realització:

- Construïu el sistema utilitzant una nova finestra de Chem3D. Poseu les molècules en una disposició similar a la de reactius. En el menú *View* seleccionar *Internal Coordinates Table*. D'aquesta manera disposarem de les coordenades internes de la molècula de treball, que ens servirà per a mesurar les distàncies i els angles. Ajusteu la finestra per a la completa visualització de la informació.
- Del submenú *Mopac Interface* seleccioneu l'opció *Minimize*. Seleccioneu el mètode AM1 i pressioneu el botó *Run*. Quan el procés haja finalitzat, en el panell *Output* de la part inferior de la finestra principal apareixerà el valor de la calor de

formació. Anoteu les distàncies del carboni al dels dos àtoms de clor (podeu visualitzar-les seleccionant l'àtom de carboni i situant el cursor a continuació sobre els àtoms de clor).

- Una vegada localitzat el mínim, calculeu, el moment dipolar i les càrregues atòmiques. Per a fer-ho, del submenú *Mopac Interface* seleccioneu l'opció *Compute properties*. Seleccioneu les propietats mencionades de la llista i pressioneu el botó *Run*. La informació apareixerà en el panell *Output*.

- Repetiu el procés, aquesta vegada per localitzar l'estat de transició. Disposeu les molècules en una disposició similar a la de l'estat de transició, és a dir amb valors similars de les distàncies carboni-clor i el grup CH₃ formant un pla. (Per a poder deformar la geometria assegureu-vos de tenir desactivada l'opció *Apply Standard Measurements* de la pestanya *Model Building* del submenú *Model Settings* que apareix en el menú *File*).

- Per a optimitzar la geometria a la de l'estat de transició, del menú *Mopac Interface* seleccioneu *Optimize to Transition State*.

b) Tipus II.

Com a exemple de la reacció de tipus II, estudiarem la reacció de Menshutkin. Aquesta reacció té lloc entre la molècula d'amoníac i el clorur de metil. Inicialment, cap de les dues molècules presenta una càrrega neta. Tanmateix, els productes són iònics, i per això podem esperar que en l'estat de transició es produïska una reordenació de les càrregues atòmiques, i per això serà molt polar.

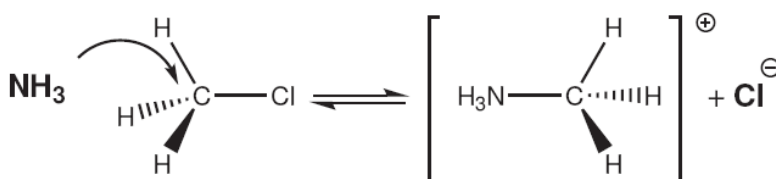


Figura 4: Mecanisme de reacció SN₂ de tipus II.

Realització:

- Procediu de la mateixa manera que en l'apartat anterior. Per a construir el model inicial és possible que hàgeu de girar un dels fragments respecte a l'altre per a situar-lo en disposició d'atac nucleòfil. Per a fer-ho, seleccioneu el fragment que s'ha de girar i seleccioneu l'opció de Rotació de la barra de ferramentes. Procediu a fer el gir mantenint pulsada la tecla Shift. Localitzeu el mínim i calculeu-ne les propietats.

- Per a localitzar l'estat de transició haureu d'anar amb molt de compte a l'hora d'elegir el punt inicial per a assegurar-vos que el programa hi arribi sense problemes. En concret, haureu d'allunyar el clor del carboni, apropar el grup NH₃ i invertir lleugerament la disposició dels hidrògens del grup metil.

- Com que aquesta reacció no és simètrica, procedirem a localitzar també els productes. Per a fer-ho, partirem de l'estat de transició, allargarem lleugerament

la distància C-Cl i acurtarem la distància C-N. Aneu a l'opció *Minimize* del submenú *Mopac Interface*. Calculeu-ne les propietats.

3 Qüestions

1. Discutiu els resultats obtinguts per a ambdós tipus de reaccions.
2. La barrera de reacció per a la SN2 entre el clorur de metil i un anió clorur serà major en fase gas que en dissolució aquosa? O serà menor? Raoneu la resposta.
3. La reacció de Menshutkin és endotèrmica en fase gas; no obstant això, és exotèrmica en dissolució aquosa. Expliqueu per què a la vista dels càlculs realitzats.

Apèndix A. Comandaments bàsics del CHEM3D

El Chem3D és un programa de modelització molecular i anàlisi. És utilitzat per a representar molècules en tres dimensions i per a calcular algunes de les seues propietats.

La barra de ferramentes

Ens proporciona les ferramentes necessàries per a realitzar les tasques més comunes. És fonamental familiaritzar-se amb les operacions que poden realitzar-se amb aquesta barra. Destaca la ferramenta de selecció, que s'usa per a actuar sobre un grup determinat d'àtoms. Quan seleccionem un objecte (àtom, enllaç, angle, diedre, etc.) aquest apareix ressaltat. En funció de la selecció que hem fet, podrem dur a terme una sèrie de tasques o unes altres.

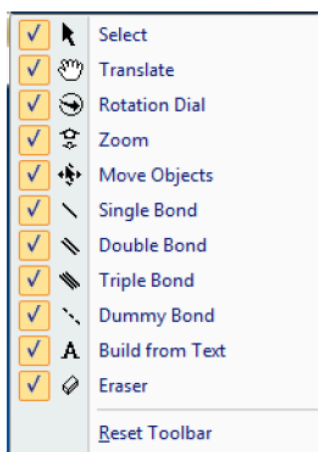


Figura 5: La barra de ferramentes.

Com dibuixem una molècula?

Hi ha tres procediments senzills:

a) Dibuixar l'estructura "a mà": Seleccionem el tipus d'enllaç en la barra de ferramentes. Fem clic en la finestra i, sense soltar el botó, arrosseguem el cursor. Soltem el botó per a dibuixar l'enllaç. Per defecte, el programa afegeix un àtom de carboni a cada costat de l'enllaç. Per a afegir més àtoms, fem clic en un dels àtoms de carboni i l'arrosseguem. El programa afegirà un àtom de carboni més. Continuem fins a finalitzar la cadena carbonada desitjada.

Per a afegir els hidrògens corresponents, en cas de ser necessari, seleccionem l'estructura (menú *Edit*, elegim l'opció *Select all* o Ctrl+A) i del menú *Structure* elegim *Rectify*. Si a més a més, volem que les distàncies d'enllaç i els angles es corresponguen amb els valors estàndard, ho seleccionarem tot de nou i del menú *Structure* escollirem *Clean up*.

Una volta dibuixada una estructura, per a canviar el tipus d'àtom, hi farem clic amb el botó dret del ratolí i seleccionarem l'opció *Replace with text Tool*. Proveu per exemple de construir una molècula de propà. A continuació, mitjançant la ferramenta *Select* seleccioneu l'àtom de carboni central i amb el botó dret *Replace with text Tool*. Apareix un requadre en què escrivim O (d'oxigen). La molècula es transforma en dimetil èter.

Proveu a continuació de transformar el propà en 1-propè. Per a esborrar la molècula anterior en el menú *Edit*, elegiu l'opció *Select all* i a continuació esborreu amb la tecla corresponent. Comenceu dibuixant el propà. Seleccionau la ferramenta de doble enllaç i amb aquesta feu clic sobre un àtom de carboni i arrossegueu fins al següent.

b) Construcció per text. Seleccionar la ferramenta Construcció per text. El cursor canvia i es mostra com una creu i una lletra A. Cliquem en la finestra una vegada i apareixerà un quadre de text. Introduir en ell la fórmula molecular del compost objectiu. Per exemple CH₃OCH₃. El programa dibuixarà la molècula, sempre que estiga en la seua base de dades.

c) El menú *View* conté diferents possibilitats per a visualitzar una molècula (Model Display). Una opció interessant en el menú *View* és el *ChemDraw Panel* que ens obri una finestra del programa ChemDraw on podem dibuixar la fórmula estructural del compost. Aquest ens apareixerà, a més, en el programa Chem3D.

Consultar les bases de dades

El Chem3D conté informació sobre una ampla sèrie de molècules i àtoms. Aquesta informació està a la nostra disposició en forma de taules. En el menú *View* hi ha totes les taules disponibles. Si en seleccionem una, se'ns obrirà una finestra amb tota la informació que el programa disposa sobre el tema. Els dos més interessants són Atom types i Substructures. El primer conté informació sobre els tipus d'àtoms i els seus noms en el programa. El segon conté els noms i els dibuixos d'alguns dels composts més comuns.

Exercicis bàsics

- Dibuixeu la molècula de ciclohexà (C_6H_{12}). Quina conformació proporciona el programa?
- Examineu la taula Atom Type. Dibuixeu un àtom de clor, i un anió clorur. Una volta dibuixats, situeu el cursor damunt d'ells. El programa mostrarà una petita finestra sobre l'àtom seleccionat on mostrarà quin tipus d'àtom és cada un.
- Examineu la taula Substructure. Dibuixeu una molècula a elecció vostra.

Referències

- [1] J. Bertrán, V. Branchadell, M. Moreno, and M. Sodupe. Química Cuántica. Síntesis, Madrid, 2002.
- [2] C.J. Cramer. Essentials of Computational Chemistry. Wiley, N. York, 2002.
- [3] I.N. Levine. Q