

Problemas de Estructura 3 Moléculas

1. Escoger una molécula, y utilizando el programa PARSEC, calcular:

- a)* La posición de los núcleos en equilibrio.
- b)* El espectro vibracional.
- c)* El momento dipolar (y el carácter iónico porcentual).
- d)* La afinidad.
- e)* La energía de ionización.

Dibujar la densidad electrónica, y comparar los resultados con los experimentales.