

## MC-TINKERATE

Cálculo de  $k$ (VTST)  
con MC-TINKERATE:

La mecánica molecular multiconfiguracional (**MCMM**: Multiconfiguration molecular mechanics) es una extensión de la MM para reacciones químicas.

Son métodos de nivel dual y que combinan cálculos de MM con cálculos de estructura electrónica.

De estos últimos se utiliza la información para puntos estacionarios y para un pequeño número de puntos no estacionarios. Con esta información se genera la superficie de energía potencial en la región intermedia entre reaccionantes y productos donde la MM pura no es válida.

Se representan como MCMM- $n$ , donde  $n$  representa el número de puntos no estacionarios ( a nivel QM) utilizados para general la MEP:

MMCM-0 entonces significa que la MEP (MCMM) se ha generado utilizando solamente la información de los puntos estacionarios.

La MEP obtenida de este modo se utiliza para cálculos de constantes de velocidad y tunelaje en el marco de VTST.

1. T. V. Albu, O. Tishchenko, J. C. Corchado, Y. Kim, J. Villà, J. Xing, H. Lin, and D. G. Truhlar, MC-TINKERATE—version 2007, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 2007.
2. J. C. Corchado, Y.-Y. Chuang, P. L. Fast, J. Villà, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, K. A. Nguyen, C. F. Jackels, V. S. Melissas, B. J. Lynch, I. Rossi, E. L. Coltíño, A. Fernández-Ramos, J. Pu, T. V. Albu, R. Steckler, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, and D. G. Truhlar, POLYRATE—version 9.1, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 2002.
3. O. Tishchenko, T. V. Albu, J. C. Corchado, Y. Kim, J. Villà, J. Xing, H. Lin, and D. G. Truhlar, MC-TINKER—version 2007, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 2007.
4. J. W. Ponder, TINKER—version 3.5, Washington University, St. Louis, MO, 1997.

## MC-TINKERATE

Cálculo de  $k$ (VTST)  
con MC-TINKERATE:

### Ficheros necesarios para cada corrida (VTST):

**nombre.81** (esp.fu81)  
**nombre.82** (esp.fu81)  
**nombre.83** (esp.fu81)  
**nombre.85** (esp.fu81)  
**nombre.dat** (poly.fu5)  
**param-nombre.prm** (param.prm)  
**run\_nombre** (script)

Se puede usar otra  
combinación de ficheros,  
pero esta es la mas simple

POLYRATE →

*Ejemplo de otra  
forma de  
organizar los  
datos de entrada*

| Reaction species | Input file | Section in poly.fu5 |
|------------------|------------|---------------------|
| Reactant 1       | esp.fu71   | REACT1              |
| Reactant 2       | esp.fu72   | REACT2              |
| Product 1        | esp.fu73   | PROD1               |
| Product 2        | esp.fu74   | PROD2               |
| Saddle point     | esp.fu75   | START               |
| Reactant well    | esp.fu77   | WELLR               |
| Product well     | esp.fu78   | WELLP               |

## run\_nombre (script)

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#BSUB -o cruebas
#BSUB -J penolBLK
#
# Job control file for MC-TINKERATE
#
set wrkdir = `pwd`
set exe = ~/mc-tinkerate2007/exemcr/mc-tinkerate2007.exe
set name = penolBLK
#
od $wrkdir
#
# Check if the subdirectory already exists
#
if (-s $wrkdir/$name) then
  echo " " > $name.err
  echo "WARNING: $name subdirectory exists" >> $name.err
  echo " " this subdirectory has been moved to { $name} old" >>
  $name.err
  mv $wrkdir/$name $wrkdir/{ $name} old
  mkdir $wrkdir/$name
else
  mkdir $wrkdir/$name
endif
#
od $wrkdir/$name
#
cp $wrkdir/$name.S1 esp.fu81
cp $wrkdir/$name.S2 esp.fu82
cp $wrkdir/$name.S3 esp.fu83
cp $wrkdir/$name.S5 esp.fu85
cp $wrkdir/param-$name.orm param.orm
cp $wrkdir/$name.dat poly.fu5
#
(time $exe) >> $name.time
#
if (-s $name.err) then
  cat $name.err >> poly.fu6
  cat $name.err >> $name.time
  /bin/rm $name.err
endif
#
cp poly.fu6 $wrkdir/$name.fu6
cp poly.fu5 $wrkdir/$name.fu5
cp poly.fu85 $wrkdir/$name.fu85
cp poly.fu86 $wrkdir/$name.fu86
cp poly.fu87 $wrkdir/$name.fu87
cp esp.fu81 $wrkdir/$name.fu81
cp $name.time $wrkdir/$name.time
#
/bin/rm *
od $wrkdir
mkdir $name
#
echo end of test 2
#
=END
```

## fu81 fu82

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

Los ficheros fu81 y fu82 input son ficheros de entrada para MC-TINKER

Contienen la información de dos puntos Shepard de la MEP.

Los ficheros son de formato "libre"

RESTRICCIÓN: el orden de los átomos tiene que ser coherente con el utilizado en MCATOMS (\*MCGENERAL) del fichero fu85 (fichero general de entrada para MC-TINKER)

En la primera línea aparece un número entero que indica el número total de átomos en el sistema seguido de algún comentario de utilidad para el usuario.

En las siguientes líneas (una por cada átomo) se proporciona el número (único) correspondiente al átomo en cuestión, el símbolo del átomo, sus coordenadas cartesianas, el número correspondiente al tipo del átomo (definido en el fichero .prm) y los índices de los átomos a los que está enlazado (números únicos).

Ejemplo:

```
11 CH2CHCH3/OH
1 C -0.490371 1.321787 0.220613 2 2 4 5
2 C -0.849650 0.239453 -0.450847 2 1 3 6
3 C -1.263850 -1.048167 0.162715 1 2 7 8 9
4 H -0.483427 1.337114 1.300853 5 1
5 H -0.209680 2.232087 -0.284267 5 1
6 H -0.851682 0.277480 -1.532662 5 2
7 H -2.274007 -1.311452 -0.143166 5 3
8 H -0.615634 -1.859362 -0.161985 5 3
9 H -1.237326 -0.999616 1.246745 5 3
10 O 2.462368 -0.354240 -0.000224 20 11
11 H 1.596041 0.079235 -0.018620 21 10
```

## param-nombre.prm

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#####  
## Atom Type Definitions ##  
#####  
  
atom      1      C      "CSP3 ALKANE"           6      12.000      4  
atom      2      C      "CSP2 ALKENE"           6      12.000      3  
atom      3      C      "CSP2 CARBONYL"         6      12.000      3  
atom      4      C      "CSP ALKYNE"            6      12.000      2  
atom      5      H      "EXCEPT ON N,O,S"     1      1.008      1  
atom      6      O      "C-O-H, C-O-C, O-O"    8      15.995      2  
atom      7      O      "O=C CARBONYL"          8      15.995      1  
atom      8      N      "NSP3"                   7      14.003      3  
atom      9      N      "NSP2"                   7      14.003      3  
atom     10      N      "NSP"                     7      14.003      1  
atom     11      F      "FLUORIDE"                9      18.998      1  
atom     12      Cl     "CHLORIDE"                 17     34.969      1  
atom     13      Br      "BROMIDE"                  35     78.918      1  
atom     14      I      "IODIDE"                   53    126.900      1  
atom     15      S      "-S- SULFIDE"              16     31.972      2  
atom     16      S+     ">S+ SULFONIUM"           16     31.972      2  
atom     17      S      ">S=O SULFOXIDE"          16     31.972      3  
atom     18      S      ">SO2 SULFONE"            16     31.972      4  
atom     19      Si     "SILANE"                   14     27.977      4  
#atom    20      *      "NOT USED"                 0      0.000      0  
atom     20      *      "O in OH radical"         8      15.995      1  
atom     21      H      "-OH ALCOHOL"              1      1.008      1  
atom     22      C      "CYCLOPROPANE"            6      12.000      4  
atom     23      H      "NH AMINE/IMINE"          1      1.008      1  
atom     24      H      "COOH CARBOXYL"           1      1.008      1  
atom     25      P      ">P- PHOSPHINE"          15     30.994      3  
  
:  
:  
:
```

## param-nombre.prm

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#####  
## Van der Waals Parameters ##  
##                               ##  
#####  
  
vdw      1      2.040      0.027  
vdw      2      1.960      0.056  
vdw      3      1.940      0.056  
vdw      4      1.940      0.056  
vdw      5      1.620      0.020  
  
:  
:  
:  
  
#####  
## Van der Waals Pair Parameters ##  
##                               ##  
#####  
  
vdwpr    1      5      3.560      0.023  
vdwpr    1      36     3.557      0.023  
vdwpr    2      21     2.650      0.550  
vdwpr    2      23     3.000      0.100  
vdwpr    2      28     2.620      0.860  
vdwpr    2      44     2.830      0.200  
vdwpr    2      73     3.000      0.750  
vdwpr    2      124    2.960      0.250  
vdwpr    4      21     2.600      0.510  
  
:  
:  
:
```



**param-nombre.prm**

Cálculo de *k*(VTST)  
con MC-TINKERATE:

```
#####  
##  
## Angle Bending Parameters (4-Ring) ##  
##  
#####  
  
angle4      1  1  9  0.550  106.500  0.000  0.000  
angle4      1  3  9  0.660  113.000  0.000  0.000  
angle4      56  6  56  0.424  107.000  0.000  0.000  
angle4      56  6  58  1.100  99.300  0.000  0.000  
angle4      56  8  56  0.580  107.200  108.200  0.000  
angle4      1  9  3  0.600  119.850  0.000  0.000  
angle4      56  9  56  0.760  122.500  0.000  0.000  
  
          :  
          :  
  
#####  
##  
## Angle Bending Parameters (3-Ring) ##  
##  
#####  
  
angle3      22  19  22  0.125  50.200  0.000  0.000  
angle3      19  22  22  0.700  65.000  0.000  0.000  
angle3      22  22  22  0.850  55.000  60.000  60.000  
angle3      22  22  38  0.450  48.000  0.000  0.000  
angle3      22  22  49  0.560  59.300  0.000  0.000  
angle3      22  22  67  0.800  56.600  0.000  0.000  
angle3      38  22  38  0.450  53.000  0.000  0.000  
  
          :  
          :  
          :
```

**param-nombre.prm**

Cálculo de *k*(VTST)  
con MC-TINKERATE:

```
#####  
##  
## Out-of-Plane Bend Parameters ##  
##  
#####  
  
opbend      2  1  0.100  
opbend      2  2  0.200  
opbend      2  3  0.050  
opbend      2  4  0.050  
opbend      2  5  0.110  
opbend      2  6  0.150  
  
          :  
          :  
          :  
  
#####  
##  
## Torsional Parameters ##  
##  
#####  
  
torsion     1  1  1  1  0.185 0.0 1  0.170 180.0 2  0.520 0.0 3  
torsion     1  1  1  2  0.200 0.0 1  -0.200 180.0 2  1.300 0.0 3  
torsion     1  1  1  3  0.000 0.0 1  0.400 180.0 2  0.010 0.0 3  
torsion     1  1  1  4  0.200 0.0 1  -0.260 180.0 2  0.093 0.0 3  
torsion     1  1  1  5  0.000 0.0 1  0.000 180.0 2  0.280 0.0 3  
torsion     1  1  1  6  0.200 0.0 1  0.000 180.0 2  0.300 0.0 3  
torsion     1  1  1  8  -0.302 0.0 1  0.696 180.0 2  0.499 0.0 3  
torsion     1  1  1  9  0.450 0.0 1  0.000 180.0 2  0.500 0.0 3  
torsion     1  1  1  11  0.780 0.0 1  0.000 180.0 2  0.300 0.0 3  
  
          :  
          :  
          :
```

**param-nombre.prm**

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#####  
##  
## Torsional Parameters (5-Ring) ##  
##  
#####  
  
torsion5 1 1 1 1 0.185 0.0 1 0.170 180.0 2 1.160 0.0 3  
torsion5 1 1 1 1 0.185 0.0 1 0.170 180.0 2 1.160 0.0 3  
torsion5 1 1 1 2 0.225 0.0 1 0.410 180.0 2 1.150 0.0 3  
torsion5 1 1 1 3 0.000 0.0 1 0.400 180.0 2 1.620 0.0 3  
torsion5 1 1 1 6 0.300 0.0 1 0.000 180.0 2 1.800 0.0 3  
torsion5 1 1 1 8 -0.302 0.0 1 0.696 180.0 2 1.360 0.0 3  
  
:  
:  
  
#####  
##  
## Torsional Parameters (4-Ring) ##  
##  
#####  
  
torsion4 3 1 1 9 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 0.250 0.0 3  
torsion4 1 1 3 9 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 0.250 0.0 3  
torsion4 1 1 9 3 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 0.250 0.0 3  
torsion4 1 3 9 1 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 0.250 0.0 3  
torsion4 56 6 56 56 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 1.830 0.0 3  
torsion4 56 8 56 56 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 3.100 0.0 3  
torsion4 58 9 56 56 -1.100 0.0 1 -0.800 180.0 2 0.000 0.0 3  
  
:  
:  
:
```

**param-nombre.prm**

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#####  
##  
## Conjugated Pisystem Bond Parameters ##  
##  
#####  
  
pibond 2 2 2.820 0.1700  
pibond 2 3 4.600 0.1660  
pibond 2 4 7.790 0.1560  
pibond 2 37 8.000 0.1850  
pibond 2 39 10.880 0.1960  
pibond 2 40 10.880 0.1960  
pibond 2 41 8.200 0.1720  
pibond 2 42 4.861 0.2980  
:  
:  
:  
  
#####  
##  
## Conjugated Pisystem Bond Parameters (5-Ring) ##  
##  
#####  
  
pibond5 2 2 4.020 0.1690  
pibond5 2 3 4.600 0.1660  
pibond5 2 37 8.250 0.2380  
pibond5 2 40 6.300 0.1960  
pibond5 2 41 8.200 0.1620  
pibond5 2 42 4.861 0.2000  
pibond5 3 3 4.600 0.1660  
pibond5 3 57 4.600 0.1660  
pibond5 37 37 0.100 0.2900  
  
:  
:  
:  
  
#####  
##  
## Conjugated Pisystem Bond Parameters (4-Ring) ##  
##  
#####  
  
pibond4 57 57 2.840 0.3900  
pibond4 57 58 4.600 0.1660  
pibond4 58 58 4.600 0.1660  
  
:  
:  
:  
  
#####  
##  
## Conjugated Pisystem Atom Parameters ##  
##  
#####  
  
piatom 2 1.0 -11.160 11.134  
piatom 3 1.0 -11.160 11.134  
piatom 4 1.0 -11.160 11.134  
piatom 6 2.0 -14.533 19.342  
piatom 7 1.0 -16.646 14.520  
piatom 10 1.0 -13.645 12.340  
piatom 37 1.0 -13.645 12.340  
  
:  
:  
:  
:
```

## param-nombre.prm

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
#new parameters
atom 20 0 "O in OH radical" 8 15.995 1
dipole 20 21 -1.6700 0.500
vdw 20 21 1.820 0.059
bond 20 21 4.71 0.9707
bond 1 5 4.7400 1.1120
bond 6 21 7.6300 0.9470

#new parameters MOMa
bond 6 29 6.0000 1.3300
bond 1 29 5.2000 1.080
angle 1 6 29 0.770 116.800 0.000 0.000
Angle 5 29 6 0.540 116.400 0.000 0.000
torsion 5 1 6 29 0.000 0.0 1 0.000 180.0 2 0.530 0.0 3
torsion 5 29 6 1 3.000 0.0 1 3.100 180.0 2 0.000 0.0 3
opbend 29 6 0.150

#new parameters Etol
angle 1 29 6 0.830 107.500 107.000 107.900
angle 29 6 21 0.750 106.800 0.000 0.000
angle 29 1 6 0.830 107.500 107.000 107.900
torsion 6 1 29 5 0.000 0.0 1 3.000 180.0 2 0.800 0.0 3
torsion 29 1 6 21 1.800 0.0 1 0.000 180.0 2 0.090 0.0 3
torsion 5 29 6 21 3.000 0.0 1 2.300 180.0 2 0.000 0.0 3
torsion 5 1 29 6 0.000 0.0 1 3.000 180.0 2 1.540 0.0 3
torsion 1 29 6 21 3.000 0.0 1 2.300 180.0 2 0.000 0.0 3

#new parameters Etol
bond 29 3 4.8000 1.5090
angle 3 29 5 0.540 109.490 109.490 109.490
angle 29 3 5 0.464 116.100 117.300 0.000
angle 29 3 7 0.850 123.500 123.500 0.000
opbend 29 3 0.590
opbend 3 29 0.590
torsion 5 29 3 5 0.115 0.0 1 0.027 180.0 2 0.285 0.0 3
torsion 5 29 3 7 -0.154 0.0 1 0.044 180.0 2 -0.086 0.0 3
```

## fu83

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

Se utiliza para introducir la información de los puntos que se utilizarán para general la MEP.

Solo consta de 2 secciones MCGEN83 y POINT

NOTA: Si se va a realizar un cálculo MCOMM-0, la sección es aun necesaria e incluirá la información del estado de transición

Palabras claves (más comúnmente utilizadas):

### sección \*MCGEN83

#### FORMHESS

Especifica el formato en el que se proporcionará el hessiano

La opción implícita es packed (GAUSSIAN fchk).

Opciones:

**-packed** hessiano compacto  
**-full** hessiano completo

Ejemplo:

FORMHESS full

**fu83 sección \*MCGEN83**

Cálculo de  $k$ (VTST)  
con MC-TINKERATE:

**NESTSP**

Especifica el número de puntos (QM) que se va a proporcionar para general la superficie MCMM. Luego el número de secciones POINT que tendrán que incluirse en este fichero será igual al establecido con esta palabra clave.

La opción implícita es 1

*Ejemplo:*

NESTSP 10

**UNITENER**

Especifica las unidades en que se proporcionarán las energías en este fichero, en cada una de las secciones POINT

(pueden seleccionarse independientemente de las elegidas para el fichero fu5)

La opción implícita es *hartree*.

Opciones:

**-hartree**

**-kcal**

*Ejemplo:*

UNITENER kcal

**fu83 sección \*MCGEN83**

Cálculo de  $k$ (VTST)  
con MC-TINKERATE:

**UNITGEOM**

Especifica las unidades en que se proporcionarán las geometrías en este fichero, en cada una de las secciones POINT

(pueden seleccionarse independientemente de las elegidas para el fichero fu5)

La opción implícita es *bohr*

Opciones:

**-ang** las geometrías se proporcionan en angstroms (GAUSSIAN .log)

**-bohr** geometrías se proporcionan en angstroms (GAUSSIAN .fchk)

*Ejemplo:*

UNITGEOM ang

**UNITGRAD**

Especifica las unidades en que se proporcionarán los gradientes en este fichero, en cada una de las secciones POINT

La opción implícita es *hperb*

Opciones:

**-hperb** los gradientes se proporcionan en hartree bohr<sup>-1</sup>  
(unidades atómicas, GAUSSIAN .fchk)

**-kcpere** los gradientes se proporcionan en kcal mol<sup>-1</sup> angstrom<sup>-1</sup>

*Ejemplo:*

UNITGRAD kcpere

**fu83 sección \*MCGEN83**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**UNITHESS**

Especifica las unidades en que se proporcionarán los hessianos en este fichero, en cada una de las secciones POINT

La opción implícita es *hperb2*

Opciones:

**-hperb2** los hessianos se proporcionan en hartree bohr<sup>-2</sup>  
(unidades atómicas, GAUSSIAN .fchk)

**-kcpera2** los hessianos se proporcionan en kcal mol<sup>-1</sup> angstrom<sup>-2</sup>

*Ejemplo:*

UNITHESS kcpera2

**fu83 sección \*POINT**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**ENERGY**

Esta variable permite especificar la energía relativa de cada punto (con respecto a las especies tomadas como reaccionantes, que es la especificada en fu81)

*Ejemplo:*

ENERGY 0.0189494

**GEOMETRY**

Especifica la geometría correspondiente a cada uno de los puntos proporcionados.

*Example:*

```
GEOMETRY
-6.69454329E-02  -1.96574211E+00  0.00000000E+00
-9.15479645E-01  8.85833624E-01  0.00000000E+00
-1.03439821E-01  3.77243731E+00  0.00000000E+00
END
```

**GRADIENT**

Especifica el gradiente correspondiente a cada uno de los puntos proporcionados

*Ejemplo:*

```
GRADIENT
-2.80934625E-08  -7.33177670E-09  2.12772599E-11
-1.41410517E-08  3.67943859E-08  1.46347707E-11
4.22345150E-08  -2.94626079E-08  -3.59120307E-11
END
```

**fu83 sección \*POINT**

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

**HESSIAN**

Permite proporcionar el hessiano correspondiente a cada uno de los puntos proporcionados

*Ejemplo:*

```
HESSIAN
  7.26849015E-03 -2.46048400E-02  9.35414373E-02
 -4.14090454E-12  5.92075782E-12 -1.80332522E-08
 -1.58285758E-02  5.21279047E-02 -6.41965167E-12
  2.30461818E-02 -6.01027280E-03  1.56393041E-02
 -4.61939022E-11 -2.75845692E-02 -1.39825157E-01
  1.52073611E-11 -3.72014964E-11 -2.99670799E-08
  1.54332795E-11  1.38812605E-10  8.11309802E-08
  8.56008545E-03 -2.75230647E-02  1.05605569E-11
 -7.21760599E-03  3.35948420E-02 -3.06406234E-11
 -1.34247944E-03  3.06151128E-02 -1.09180741E-01
  4.02730797E-11 -2.45433355E-02  1.24185853E-01
 -1.01611061E-10 -6.07177726E-03 -1.50051120E-02
 -1.10664188E-11  3.12807014E-11  4.74362771E-08
 -9.01366720E-12 -9.26186406E-11 -5.11638840E-08
  2.00800682E-11  6.13379559E-11  3.77438791E-09
END
```

**fu83**

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

\*MCGEN83

*Ejemplo*

NESTSP 1

UNITENER kcal  
FORMHESS packed

\*POINT 1

ENERGY -3.422876

GEOMETRY

```
-6.14228183E-01  2.04747195E+00 -5.03985431E-01  1.17139581E+00  8.29945148E-01
  7.93633803E-01  2.89279166E+00 -1.09396998E+00 -2.90113016E-01 -8.50623714E-01
  1.75771239E+00 -2.50505735E+00 -1.78768725E+00  3.46177038E+00  3.71272020E-01
  1.38512356E+00  1.23747069E+00  2.78725958E+00  4.85648136E+00 -5.21209488E-01
 -7.25843549E-02  2.67997927E+00 -2.89091317E+00  6.84375421E-01  2.50843705E+00
 -1.39745428E+00 -2.27994525E+00 -3.26604491E+00 -1.382266364E+00 -8.80963002E-02
 -3.36310676E+00 -1.28675006E+00  1.72223820E+00
```

END

GRADIENT

```
-5.32642606E-06  9.87108640E-06 -2.53632284E-06  9.80987718E-06 -1.00388301E-05
  1.04027692E-05  3.41580940E-06  2.97083118E-06  1.98901490E-06 -6.66946667E-06
 -9.81646523E-06 -1.35316432E-06 -1.99758446E-06  4.28573187E-06 -2.10344948E-06
 -1.66825085E-06  2.08926089E-06 -9.06219742E-07  7.73304645E-07  1.47407369E-06
  2.23487532E-06  1.31738340E-07  1.59897853E-06  2.45677080E-06  1.92033150E-06
 -7.38232866E-07  1.37590063E-06 -3.67834693E-06 -6.14259899E-06  1.14990095E-05
  3.28901393E-06  4.44616455E-06 -2.30591840E-05
```

END

HESSIAN

```
  4.82601997E-01 -3.52120976E-01  4.35810272E-01  1.32403255E-01  2.90855073E-02
  7.06600275E-01 -2.83310793E-01  1.93961003E-01 -1.67019415E-01  5.17883815E-01
  1.70625970E-01 -1.87976332E-01  9.96316841E-02 -2.83462467E-01  4.21284603E-01
 -1.60036758E-01  1.08882119E-01 -2.33186267E-01  1.62001557E-01  1.06339777E-02
  6.86706734E-01 -1.65820976E-02  2.18109335E-02  7.35549760E-03 -1.39092626E-01
  7.29956698E-02  3.73930906E-02  5.47684346E-01  1.81346283E-02 -8.14642726E-03
 -6.95272536E-03  7.64112499E-02 -1.59425220E-01 -4.79901065E-02  1.16268188E-02
  5.42083741E-01 -1.19568899E-02  1.13566629E-02  1.18385151E-02  4.33978731E-02
```

## fu83

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
*MCGEN83
NESTSP 3

*POINT 1
ENERGY 0.0189494
GEOMETRY
-6.69454329E-02 -1.96574211E+00 0.00000000E+00 -9.15479645E-01 8.85833624E-01
0.00000000E+00 -1.03439821E-01 3.77243731E+00 0.00000000E+00
END
GRADIENT
-2.80934625E-08 -7.33177670E-09 2.12772599E-11 -1.41410517E-08 3.67943859E-08
1.46347707E-11 4.22345150E-08 -2.94626079E-08 -3.59120307E-11
END
HESSIAN
7.26849015E-03 -2.46048400E-02 9.35414373E-02 -4.14090454E-12 5.92075782E-12
-1.80332522E-08 -1.58285758E-02 5.21279047E-02 -6.41965167E-12 2.30461818E-02
-6.01027290E-03 1.56393041E-02 -4.61939022E-11 -2.75845692E-02 -1.39825157E-01
1.52073611E-11 -3.72014964E-11 -2.99670799E-08 1.54332795E-11 1.38812605E-10
8.11309802E-08 8.56008545E-03 -2.75230647E-02 1.05605569E-11 -7.21760599E-03
3.35948420E-02 -3.06406234E-11 -1.34247944E-03 3.06151128E-02 -1.09180741E-01
4.02730797E-11 -2.45433355E-02 1.24185853E-01 -1.01611061E-10 -6.07177726E-03
-1.50051120E-02 -1.10664188E-11 3.12807014E-11 4.74362771E-08 -9.01366720E-12
-9.26186406E-11 -5.11638840E-08 2.00800682E-11 6.13379559E-11 3.77438791E-09
END

*POINT 2
ENERGY 0.0155076
GEOMETRY
1.88783626E-02 -1.77342847E+00 0.00000000E+00 -9.64608741E-01 7.58182633E-01
0.00000000E+00 -1.48060031E-02 3.98045268E+00 0.00000000E+00
END
GRADIENT
-7.04527640E-03 2.08625864E-02 4.20704162E-11 1.23914913E-02 9.85972298E-05
-1.53427741E-11 -5.34621492E-03 -2.09611837E-02 -2.67276420E-11
END
HESSIAN
2.73425524E-02 -8.91295912E-02 2.38375655E-01 -1.64800680E-11 3.20686826E-11
-7.62842906E-03 -3.22699724E-02 9.74643152E-02 1.37702563E-11 3.31359082E-02
```

## fu85

Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

Es el fichero principal de entrada de datos para MC-TINKER (análogo al fu5 para POLYRATE)

Puede contener hasta 4 secciones:

- \*MCGENERAL
- \*MCENERGETICS
- \*SYMMETRY
- \*RESONANCE

Es un fichero de formato con estilo palabras claves

Los encabezamientos de cada sección deben ser precedidos por el símbolo \*

Es indiferente a mayúsculas y minúsculas

Cualquier línea que comience con el símbolo # se considera un comentario

**fu85 \*MCGENERAL**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

Palabras claves más utilizadas para esta sección:

**MCATOMS**

Es obligatoria. Se usa para especificar los átomos que conforman el sistema en estudio. Cada línea corresponde a un átomo e incluye el número secuencial  $n$  (único), una etiqueta que identifica de que átomo se trata (número atómico o símbolo químico) y la masa del átomo en unidades atómicas (si la masa no se especifica se utilizará la del isótopo más abundante).

*Ejemplo:*

```
MCATOMS
 1 C
 2 H
 3 H
 4 H 1.0078
 5 H 2.0140
END
```

*Nota:* los números (únicos) en la primera columna tienen que ser consistentes con las definiciones correspondientes en el fichero .dat (fu5) para POLYRATE y con las entradas de los ficheros fu81, fu82 y fu85. Si se utiliza otro esquema de ficheros también tendrá que ser consistente con estos.

**fu85 \*MCGENERAL**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**MCTITLE**

Permite incluir un título o comentario que identifique la corrida. Puede contener hasta cinco líneas de hasta 80 caracteres cada una.

*Ejemplo:*

```
MCTITLE
HO - H - CH3 System
Resonance function constant at 28 kcal/mol
END
```

```
*MCGENERAL
```

```
MCTITLE
CH2CHCH3 + OH -> CH2(OH)CHCH3
END
```

```
MCATOMS
 1 C
 2 C
 3 C
 4 H
 5 H
 6 H
 7 H
 8 H
 9 H
10 O
11 H
END
```

**fu85 \*MCENERGETICS**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**EDIFF**

Con esta palabra clave se especifica la diferencia de energía (hartrees) entre la configuración 1 y 2 (fu81 y fu82, respectivamente)

La opción implícita es 0.00

*Ejemplo:*

```
EDIFF -0.0125479
```

**ZERO1****ZERO2**

ZERO1 especifica la energía MM de la configuración 1 (fu81) y ZERO2 especifica la energía MM de la configuración 2 (fu82), ambas en hartrees

(como mínimos en MM, o sea incluye una corrección a las energías QM)

La opción implícita es 0.00 en ambos casos

*Ejemplo:*

```
ZERO1 0.0035921
```

```
*MCENERGETICS
```

```
ZERO1 0.00
```

```
ZERO2 0.00
```

```
EDIFF -0.04494
```

**fu85 \*RESONANCE**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**ICSHEPARD**

Se utiliza para definir las coordenadas internas correspondientes al sistema en estudio (sentido químico). Las coordenadas internas a tener en cuenta son: distancias de enlaces, ángulos de enlaces, ángulos dihedros.

Para definir estas coordenadas se utilizan los números únicos correspondientes a los átomos involucrados (*Nota:* se cuidadosos con la coherencia de estos números para todos los ficheros involucrados en cada corrida)

Las definiciones de estas coordenadas deben ser coherentes con las de INTDEF de la sección \*PATH del fichero fu5 (dat).

Cuando un ángulo de enlace es cercano a  $180^\circ$  ( $>175^\circ$ ) es conveniente definir esta coordenada torsión lineal degenerada para lo cual se utiliza el símbolo igual para unir los átomos en lugar del guión (ver ejemplo)

*Ejemplo:*

```
ICSHEPARD
```

```
2-1 3-2 6-2 3-6 2-4 5-2 7-6
```

```
1-2-3 3-2-4 1-2-4 2=4=5 → torsión lineal degenerada
```

```
1-2-4-5
```

```
END
```

*Nota:* El símbolo gato (#) no puede utilizarse en el fragmento correspondiente a esta palabra clave.

**fu85 \*RESONANCE**Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:**ICDISTANCE**

Se usa para definir cuales coordenadas internas deben estar involucradas en la coordenada de reacción. Para definir estas coordenadas se utilizan los números únicos correspondientes a los átomos involucrados y las coordenadas especificadas tienen que estar contenidas en las definiciones de ICSHEPARD. No tiene opciones implícitas por lo que es obligatoria.

*Ejemplo:*

```
ICDISTANCE
  2-5  2-6  6-5
END
```

*Nota:* El símbolo gato (#) no puede utilizarse en el fragmento correspondiente a esta palabra clave.

**LINEARITY**

Permite especificar si el sistema es lineal o no.

Opciones:

```
-linear  el sistema es lineal
-nonlinear  el sistema no es lineal (implícito)
```

**fu85***Ejemplo*Cálculo de  $k(VTST)$   
con MC-TINKERATE:

```
*MCGENERAL
MCTITLE
CH2CHCH3 + OH -> CH2(OH)CHCH3
END

MCATOMS
  1  C
  2  C
  3  C
  4  H
  5  H
  6  H
  7  H
  8  H
  9  H
 10  O
 11  H
END

ORDERCALC mcm

*MCENERGETICS
ZERO1 0.00
ZERO2 0.00
EDIFF -0.04494

*RESONANCE
ICSHEPARD
  2-1 3-2 4-1 5-1 6-2 7-3 8-3 9-3 10-1 11-10
  3-2-1 4-1-2 5-1-2 6-2-3 7-3-2 8-3-2 9-3-2 10-1-2 11-10-1
  4-1-2-3 5-1-2-3 6-2-3-7 7-3-2-1 8-3-2-1 9-3-2-1 10-1-2-3 11-10-1-2
END

ICDISTANCE
 10-1
END
```

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

fu81

| 11 CH3OCH3/OH |   |           |           |           |    |    |   |   |   |  |
|---------------|---|-----------|-----------|-----------|----|----|---|---|---|--|
| 1             | C | 1.037595  | -1.164104 | 0.002888  | 1  | 2  | 3 | 4 | 5 |  |
| 2             | H | 0.361007  | -2.009656 | -0.009621 | 5  | 1  |   |   |   |  |
| 3             | H | 1.685890  | -1.210792 | -0.872673 | 5  | 1  |   |   |   |  |
| 4             | H | 1.653873  | -1.211328 | 0.901288  | 5  | 1  |   |   |   |  |
| 5             | O | 0.263306  | -0.001116 | -0.011181 | 6  | 1  | 6 |   |   |  |
| 6             | C | 1.028777  | 1.167738  | 0.002879  | 1  | 5  | 7 | 8 | 9 |  |
| 7             | H | 0.345845  | 2.008164  | -0.009830 | 5  | 6  |   |   |   |  |
| 8             | H | 1.644443  | 1.219513  | 0.901446  | 5  | 6  |   |   |   |  |
| 9             | H | 1.676977  | 1.219390  | -0.872445 | 5  | 6  |   |   |   |  |
| 10            | O | -2.538480 | -0.002922 | 0.002300  | 20 | 11 |   |   |   |  |
| 11            | H | -1.564873 | -0.004792 | -0.001717 | 21 | 10 |   |   |   |  |

fu82

| 11 CH3OCH3/OH |    |           |           |           |    |    |    |   |   |  |
|---------------|----|-----------|-----------|-----------|----|----|----|---|---|--|
| 1             | C  | -1.045462 | -1.065443 | 0.159883  | 1  | 2  | 3  | 4 | 5 |  |
| 2             | H  | -1.510943 | -1.775613 | -0.510520 | 5  | 1  |    |   |   |  |
| 3             | H  | -0.030825 | -1.381600 | 0.386285  | 5  | 1  |    |   |   |  |
| 4             | H  | -1.627059 | -0.998556 | 1.077788  | 5  | 1  |    |   |   |  |
| 5             | O  | -1.033507 | 0.176617  | -0.501895 | 6  | 1  | 6  |   |   |  |
| 6             | C* | -0.566867 | 1.199159  | 0.214185  | 29 | 5  | 7  | 8 |   |  |
| 7             | H  | -0.654821 | 2.151973  | -0.277664 | 5  | 6  |    |   |   |  |
| 8             | H  | -0.606680 | 1.125555  | 1.292419  | 5  | 6  |    |   |   |  |
| 9             | H  | 1.588508  | 0.471489  | 0.071166  | 21 | 10 |    |   |   |  |
| 10            | O  | 2.263265  | -0.208430 | 0.064945  | 6  | 9  | 11 |   |   |  |
| 11            | H  | 2.677734  | -0.141040 | -0.788284 | 21 | 10 |    |   |   |  |

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

fu83

```

*MCGEN83
NESTSP 1
UNITENER kcal
FORMHNESS packed
*POINT 1
ENERGY 0.3926
GEOMETRY
-2.56024387E+00 -1.57161752E+00 2.76149280E-01 -4.01318616E+00 -2.42042790E+00
-8.87186900E-01 -9.59471789E-01 -2.85719231E+00 4.33852551E-01 -3.31835288E+00
-1.21546286E+00 2.15965068E+00 -1.83291320E+00 6.86896351E-01 -8.89259938E-01
7.94067071E-03 1.95191518E+00 4.10516349E-01 3.85734440E-01 3.73573168E+00
-5.18847173E-01 -4.48210874E-01 2.22479155E+00 2.40483694E+00 1.86875983E+00
8.06533553E-01 4.34449683E-01 4.04128751E+00 -9.14350905E-01 8.58953066E-02
4.13155211E+00 -7.36123242E-01 -1.71983250E+00
END
GRADIENT
9.64848754E-06 1.43505109E-05 -3.92371622E-06 3.11262279E-06 -5.76295038E-06
4.44577084E-06 1.39510846E-07 -1.76795177E-06 5.52579508E-06 1.76636397E-06
7.95248966E-07 7.72552783E-07 1.79784019E-05 -5.04627126E-06 2.47291837E-05
-2.43447025E-05 -2.29851154E-05 -5.75665502E-06 -3.94336571E-06 -3.39669866E-06
-7.73112899E-06 -5.43379964E-06 4.22547483E-06 -5.67600048E-06 7.27405663E-06
1.88343898E-05 -2.22571576E-05 -7.32871320E-06 -4.60629597E-06 7.92450061E-06
1.13113752E-06 5.35965892E-06 1.94685541E-06
END
HESSIAN
6.15835245E-01 -2.19694020E-03 5.34800919E-01 3.85096548E-02 4.85927387E-02
5.91011090E-01 -1.95038671E-01 -7.97725711E-02 -1.17725304E-01 2.07086996E-01
-7.21422365E-02 -9.06544439E-02 -6.10079753E-02 9.30926737E-02 1.09672208E-01
-1.24726314E-01 -7.15371252E-02 -1.53624221E-01 1.27291698E-01 6.74115963E-02
1.56801707E-01 -2.26412195E-01 1.29425752E-01 -1.32567114E-02 -1.56017576E-02
1.33294902E-02 9.47094289E-04 2.33027296E-01 1.22206726E-01 -1.43042117E-01

```

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

fu85

```
*MCGENERAL
MCTITLE
CH3OCH3 + OH -> CH3OCH2 + H2O; calculo TST a nivel mpwblk camino anti
END

MCAATOMS
1 C
2 H
3 H
4 H
5 O
6 C
7 H
8 H
9 H
10 O
11 H
END

ORDERCALC mcm

*MCENERGETICS
ZERO1 0.00
ZERO2 0.00
EDIFF -0.02556

*RESONANCE
ICSHEPARD
2-1 3-1 4-1 5-1 6-5 7-6 8-6 9-6 10-9 11-10
3-1-5 2-1-5 4-1-5 6-5-1 7-6-5 8-6-5 9-6-5 10-9-6 11-10-9
2-1-5-6 3-1-5-6 4-1-5-6 7-6-5-1 8-6-5-1 9-6-5-1 10-9-6-5 11-10-9-6
END

ICDISTANCE
9-6 10-9
END
```

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

fu5

A diferencia de lo que vimos para correr solamente POLYRATE en este caso las energías para cada punto estacionario deben expresarse relativas al punto de referencia (reaccionantes) en vez de utilizar sus valores absolutos

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

```

*REACT1
STATUS 6
INITGEOM geom
GEOM
1 -1.154143 0.192018 0.000092
2 -2.003769 -0.480348 -0.001837
3 -1.208061 0.828847 0.886476
4 -1.205924 0.830087 -0.885499
5 0.000014 -0.582675 0.000119
6 1.154132 0.192038 -0.000087
7 2.003621 -0.480460 -0.001421
8 1.205968 0.830489 -0.885361
9 1.208122 0.828448 0.886661
END

*PROD1
STATUS 6
INITGEOM geom
GEOM
1 -1.121394 0.165314 0.012779
2 -1.915832 -0.553183 -0.141621
3 -1.247691 0.644452 0.981563
4 -1.162413 0.922413 -0.769709
5 0.089621 -0.535049 -0.038821
6 1.185569 0.222709 0.066758
7 2.106901 -0.323484 -0.017366
8 1.117018 1.262057 -0.219521
END

fu5
*REACT2
STATUS 6
INITGEOM geom
GEOM
10 0.000000 0.000000 0.107121
11 0.000000 0.000000 -0.856966
END

*PROD2
STATUS 6
INITGEOM geom
GEOM
10 0.000000 0.000000 0.115228
11 0.000000 0.756225 -0.460912
9 0.000000 -0.756225 -0.460912
END

*START
STATUS 4
INITGEOM geom
GEOM
1 -1.354823 -0.831664 0.146132
2 -2.123687 -1.280835 -0.469479
3 -0.507731 -1.511961 0.229585
4 -1.755997 -0.643195 1.142838
5 -0.969936 0.363490 -0.470576
6 0.004202 1.032909 0.217236
7 0.204122 1.976864 -0.274562
8 -0.237183 1.177309 1.272585
9 0.988905 0.426799 0.229901
10 2.138557 -0.483854 0.045454
11 2.186323 -0.389540 -0.910096
END
    
```

**Ejemplo:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$**

Cálculo de  $k(\text{VTST})$   
con MC-TINKERATE:

**fu6 output**

Classical and adiabatic energies (kcal/mol), effective CD-SC reduced mass ( $\mu$ ) (a.u.), and frequencies ( $\text{cm}^{-1}$ ) vs.  $s$

| $s(\text{bohr})$ | VMEP    | $V_a^G$ | $\mu^{\text{CD-SC}}$ | frequencies ( $\text{cm}^{-1}$ ) |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|------------------|---------|---------|----------------------|----------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| -0.999           | -3.4229 | 54.4374 | 0.00                 | 3908                             | 3321 | 3227 | 3213 | 3196 | 3161 | 3099 | 1715 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1220 |
|                  |         |         |                      | 1081                             | 1027 | 984  | 957  | 957  | 641  | 567  | 430  | 224  | 164  | 127  | 89i  |      |      |
| -0.972           | -3.4229 | 54.5259 | 1822.84              | 3893                             | 3321 | 3227 | 3213 | 3196 | 3161 | 3099 | 1714 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1219 |
|                  |         |         |                      | 1080                             | 1027 | 984  | 957  | 957  | 641  | 587  | 430  | 231  | 202  | 139  | 87i  |      |      |
| -0.054           | -3.4229 | 54.5278 | 1822.84              | 3893                             | 3321 | 3227 | 3213 | 3196 | 3161 | 3100 | 1714 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1219 |
|                  |         |         |                      | 1080                             | 1027 | 984  | 957  | 957  | 641  | 587  | 430  | 224  | 170  | 132  | 72   |      |      |
| -0.027           | -3.4229 | 54.4363 | 1822.84              | 3907                             | 3321 | 3227 | 3213 | 3196 | 3161 | 3100 | 1715 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1220 |
|                  |         |         |                      | 1081                             | 1027 | 984  | 957  | 957  | 641  | 567  | 430  | 223  | 164  | 127  | 88i  |      |      |
| 0.000            | -3.4199 | 54.5600 | 1822.84              | 3902                             | 3321 | 3227 | 3213 | 3196 | 3161 | 3100 | 1715 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1220 |
|                  |         |         |                      | 1080                             | 1027 | 985  | 957  | 957  | 641  | 571  | 430  | 224  | 170  | 132  | 72   |      |      |
| 0.027            | -3.4229 | 54.4317 | 1822.84              | 3903                             | 3321 | 3228 | 3213 | 3196 | 3161 | 3100 | 1715 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1219 |
|                  |         |         |                      | 1080                             | 1027 | 985  | 957  | 957  | 641  | 566  | 430  | 223  | 163  | 127  | 86i  |      |      |
| 0.054            | -3.4229 | 54.5241 | 1822.84              | 3889                             | 3321 | 3228 | 3213 | 3196 | 3161 | 3100 | 1714 | 1516 | 1500 | 1473 | 1427 | 1342 | 1219 |
|                  |         |         |                      | 1080                             | 1027 | 984  | 957  | 957  | 641  | 566  |      |      |      |      |      |      |      |

## Ejemplo: $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{H}_2\text{O}$

### fu15 output

Wed Jul 30 12:41:17 2008

CH3OCH3 + OH -> CH3OCH2 + H2O; calculo TST a nivel mpwbk  
camino anti

### fu15

Summary of forward rate constants ( $\text{cm}^3/\text{molecule-s}$ ) :

| T(K)   | TST      | CVT      | CVT/ZCT  | CVT/SCT  | ICVT     | ICVT/SCT |
|--------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 280.00 | 8.82E-13 | 4.16E-13 | 4.36E-13 | 4.38E-13 | 4.16E-13 | 4.66E-13 |
| 290.00 | 9.06E-13 | 4.34E-13 | 4.52E-13 | 4.54E-13 | 4.34E-13 | 4.83E-13 |
| 298.15 | 9.26E-13 | 4.49E-13 | 4.66E-13 | 4.68E-13 | 4.49E-13 | 4.96E-13 |
| 300.00 | 9.30E-13 | 4.52E-13 | 4.69E-13 | 4.71E-13 | 4.52E-13 | 4.99E-13 |
| 310.00 | 9.56E-13 | 4.71E-13 | 4.86E-13 | 4.88E-13 | 4.71E-13 | 5.17E-13 |
| 320.00 | 9.82E-13 | 4.90E-13 | 5.04E-13 | 5.06E-13 | 4.90E-13 | 5.34E-13 |
| 340.00 | 1.04E-12 | 5.28E-13 | 5.22E-13 | 5.24E-13 | 5.28E-13 | 5.71E-13 |
| 360.00 | 1.10E-12 | 5.68E-13 | 5.59E-13 | 5.61E-13 | 5.68E-13 | 6.09E-13 |
| 380.00 | 1.16E-12 | 6.09E-13 | 5.98E-13 | 6.00E-13 | 6.09E-13 | 6.48E-13 |
| 400.00 | 1.22E-12 | 6.52E-13 | 6.39E-13 | 6.40E-13 | 6.52E-13 | 6.90E-13 |

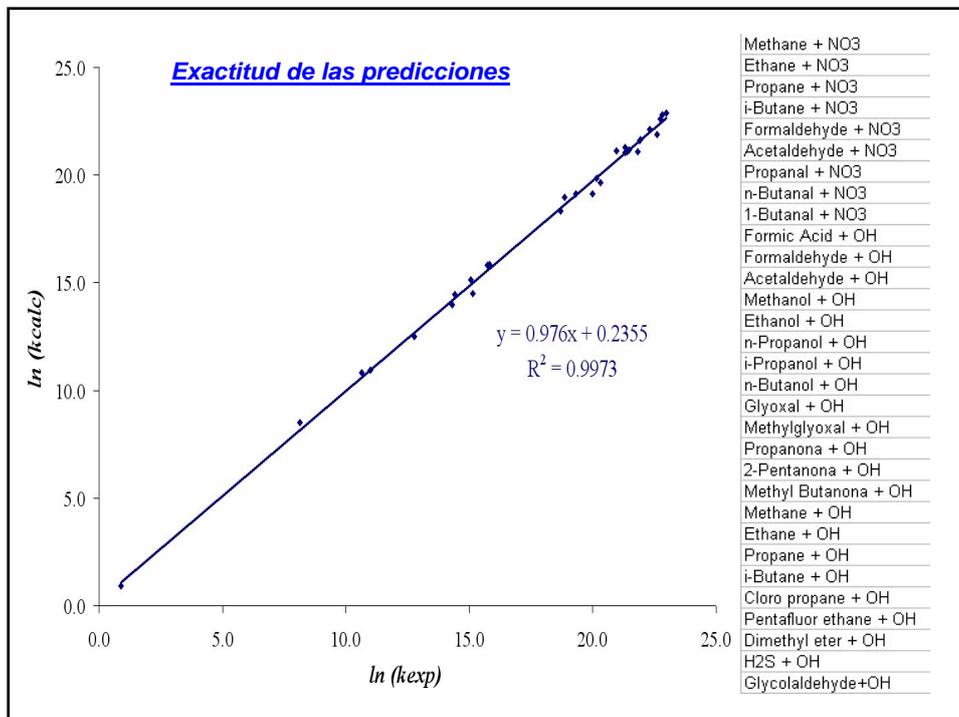
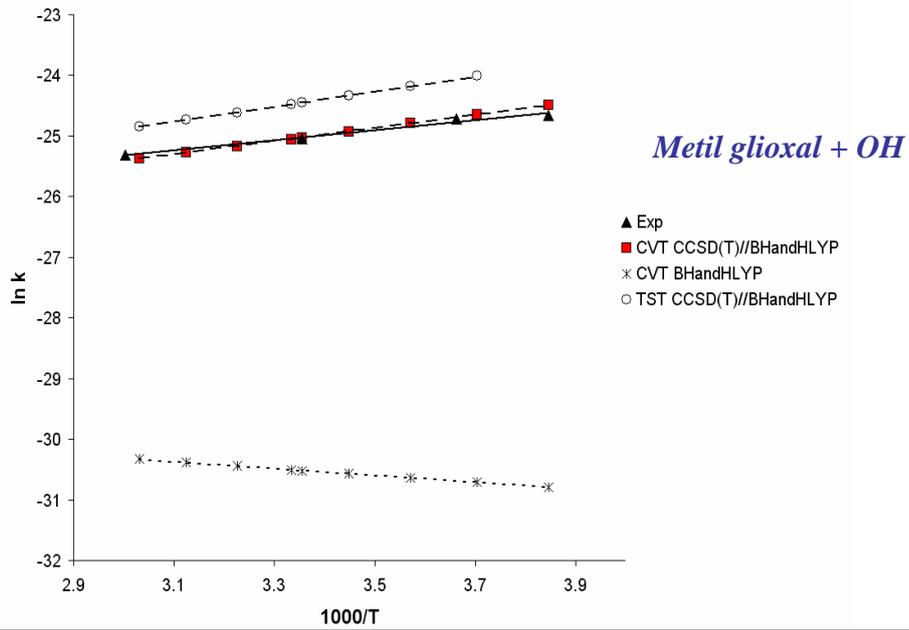
## EJEMPLOS

Cálculo de  $k(\text{VTST})$   
con MC-TINKERATE:

| + OH           |                               | $k_{298}(\text{exp})$  | $k_{298}(\text{calc})$ |          |
|----------------|-------------------------------|------------------------|------------------------|----------|
| Etanol         | CBS-QB3                       | $3.26 \times 10^{-12}$ | $3.50 \times 10^{-12}$ | (1.07 ↑) |
| Etanal         | CBS-QB3                       | $1.62 \times 10^{-11}$ | $1.13 \times 10^{-11}$ | (1.43 ↓) |
| Propano        | CCSD(T)/BH&HLYP/6-311++G(d,p) | $3.80 \times 10^{-13}$ | $3.42 \times 10^{-13}$ | (1.11 ↓) |
| Glicolaldehido | CCSD(T)/BH&HLYP/6-311++G(d,p) | $1.10 \times 10^{-11}$ | $7.29 \times 10^{-12}$ | (1.51 ↓) |
| Glioxal        | CCSD(T)/BH&HLYP/6-311++G(d,p) | $1.10 \times 10^{-11}$ | $5.35 \times 10^{-12}$ | (2.06 ↓) |
| Metil-glioxal  | CCSD(T)/BH&HLYP/6-311++G(d,p) | $1.36 \times 10^{-11}$ | $1.35 \times 10^{-11}$ | (1.01 ↓) |
| Acetileno      | CBS-QB3                       | $1.83 \times 10^{-12}$ | $2.40 \times 10^{-12}$ | (1.07 ↑) |
| Propeno        | G3                            | $3.01 \times 10^{-11}$ | $3.68 \times 10^{-11}$ | (1.31 ↑) |

$\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$

## EJEMPLOS



**Gracias  
y buena suerte**