

1. Usando el programa **Avogadro** construya una molécula de agua. Ubique los átomos de hidrógeno a una distancia inicial de aproximadamente 4 Å al átomo de oxígeno y optimice la geometría del sistema. Utilice la configuración que viene por default. ¿Cómo puede estar seguro de que se han realizado todos los pasos fijados para la optimización?
2. Busque la longitud, ángulo y energía de enlace reportada para esta molécula y compare esos datos con los obtenidos de la optimización de la geometría. ¿Cuál es el porcentaje de error del cálculo?
3. Ahora cambie el campo de fuerzas al *UFF*, la convergencia a 1×10^{-10} , el número de pasos a mil y realice de nuevo la optimización. Compare con los resultados con los datos reportados ¿ahora es mejor la precisión del cálculo?
4. Consulte sobre la geometría de las moléculas de agua en el cristal de hielo hexagonal en la siguiente página: http://www1.lsbu.ac.uk/water/hexagonal_ice.html, el archivo en formato pdb de una celda de este cristal se puede descargar de <http://www1.lsbu.ac.uk/water/ice1hsc.html>. Abra el archivo en **Avogadro** y realice lo siguiente:
 - Mida las distancias entre los átomos de oxígeno en los hexagonos y la distancia entre los hexagonos.
 - Realice una optimización de la geometría usando la herramienta **Auto Optimization Tool** del menú principal (el ícono con la letra E y una flecha verde debajo) con el método de los gradientes conjugados. Observe los cambios producidos.
 - Explique la razón por la cual la optimización cambia la geometría del sistema y no la mantiene.