

Práctica 5: Equilibrio conformacional del Etano

1.- Dibujar la molécula de etano y minimizarla. Variar el ángulo de torsión H-C-C-H, desde 0° hasta 360° con intervalos de 60°, y minimizar cada una de las conformaciones obtenidas. (Atención: fijar, en cada caso, la correspondiente restricción sobre el ángulo de torsión H-C-C-H).

	ETANO Ángulo de Torsión (H-C-C-H)						
	0°	60°	120°	180°	240°	300°	360°
Energía Potencial							
Energía de Tensión							
Energía de Flexión							
Energía de Tensión-Flexión							
Energía de Flexión-Flexión							
Energía de Torsión							
Energía de Tensión-Torsión							
Energía de Van der Waals							

2.- Dibujar el diagrama rotacional del etano:

0°	60°	120°	180°	240°	300°	360°

3.- Dibujar en proyección de Newman todas las conformaciones (identificando los átomos en cada una de ellas) que se han minimizado y explicar los resultados obtenidos.