

Práctica 13: La oxima de la ciclohexanona

Utilizando SCAN encuentra todas las conformaciones de mínima energía de la oxima de la ciclohexanona.

Escribe las energías de cada una de las conformaciones obtenidas así como los distintos valores de los parámetros que has tenido que incluir en el fichero KEY y los parámetros originales utilizados para suplir los que no están disponibles en el Campo de Fuerza.