

Práctica 1: Modelización Molecular del Metano

1.- Minimizar utilizando el programa TINKER (con el campo de fuerzas MM3) y responder a las cuestiones siguientes:

Distancia C-H:

Ángulo H-C-H:

Energía Potencial:

Energía de Tensión:

Energía de Flexión:

Momento Dipolar:

2.- Calcular el volumen y el área molecular del metano: