

Práctica 2: Modelización Molecular del Etano

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

Distancia C-H: Distancia C-C: Ángulo H-C-H: Ángulo H-C-C: Ángulo diedro H-C-C-H: Energía Potencial: Energía de Flexión: Volumen molecular:		Energía de Flexión-Flexión: Energía de Tensión-Torsión: Energía de Tensión: Energía de Tensión-Flexión: Energía de Torsión: Momento Dipolar: Energía de Van der Waals: Área molecular:	
Dibujar en proyección de Newman la molécula de etano minimizada			