

Práctica 4: Modelización molecular del Etino

1.- Minimizar la molécula de etino 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-C: Ángulo diedro H-C-C-H: Energía Potencial: Energía de Torsión: Volumen molecular:		Energía de Tensión: Energía de Tensión-Flexión: Momento Dipolar: Energía de Van der Waals: Energía de Flexión: Área molecular:	
--	--	---	--