

## Práctica 6: Equilibrio conformacional del Butano

1.- Dibujar la molécula de butano y minimizarla. Variar el ángulo de torsión  $C_1-C_2-C_3-C_4$ , desde  $0^\circ$  hasta  $360^\circ$  con intervalos de  $60^\circ$ , y minimizar cada una de las conformaciones obtenidas. (Atención: fijar, en cada caso, la correspondiente restricción sobre el ángulo de torsión  $C_1-C_2-C_3-C_4$ ).

	BUTANO Ángulo de Torsión ( $C_1-C_2-C_3-C_4$ )						
	$0^\circ$	$60^\circ$	$120^\circ$	$180^\circ$	$240^\circ$	$300^\circ$	$360^\circ$
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 butano:

$0^\circ$	$60^\circ$	$120^\circ$	$180^\circ$	$240^\circ$	$300^\circ$	$360^\circ$

3.- Dibujar la proyección de Newman, a lo largo del enlace  $C_2-C_3$ , de todas las conformaciones (identificando los átomos en cada una de ellas) que se han minimizado y explicar los resultados obtenidos.