

Práctica 8: Equilibrio conformacional del *meso*-2,3-Dibromobutano

1.- Dibujar el diagrama conformacional y completar la siguiente tabla de energías para el compuesto *meso*-2,3-dibromobutano. Utilizar los programas SCAN (*Búsqueda Conformacional*) y SADDLE (*Estado de transición*) para el cálculo, usando como ángulo de torsión Br-C-C-Br.

	<i>meso</i> -2,3-dibromobutano						
Ángulo Br-C-C-Br							
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.

0°	60°	120°	180°	240°	300°	360°

3.- Dibujar la proyección de Newman de todas las conformaciones, a lo largo del enlace C₂-C₃, (identificando los átomos en cada una de ellas) que se han minimizado y explicar los resultados obtenidos.