

Práctica 9: Equilibrio conformacional del 1-Cloropropano

1.- Dibujar el diagrama conformacional y completar la siguiente tabla de energías para el compuesto 1-cloropropano. Utilizar los programas SCAN (*Búsqueda Conformacional*) y SADDLE (*Estado de transición*) para el cálculo. (El compuesto es simétrico y es necesario utilizar el proceso de reenumeración para determinar todos los Estados de Transición, en total se obtienen las seis conformaciones).

	1-cloropropano					
Ángulo C-C-C-Cl						
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 C₁-C₂, (identificando los átomos en cada una de ellas) que se han minimizado y explicar los resultados obtenidos.