

Práctica 19: Cálculo Teórico del Buta-1,3-dieno

El Buta-1,3-dieno es un dieno muy utilizado a nivel industrial. Su equilibrio conformacional muestra dos estructuras distintas *s-cis* y *s-trans*. La primera de ellas posee un ángulo de torsión C-C-C-C de 0° mientras que la segunda tiene uno de 180° .

- 1.- Determinar la energía por Mecánica Molecular de ambos rotámeros.
- 2.- Calcular el estado de transición para la interconversión entre ambos rotámeros.
- 3.- Incluir un gráfico de la estructura del estado de transición.
- 4.- Caracterizar completamente ese estado de transición, indicando su frecuencia negativa.

La conformación *s-cis* es la conformación activa para dar lugar a la reacción de Diels Alder.

- 5.- Calcular la energía con MOPAC de las conformaciones *s-cis* y *s-trans*.

- 6.- Dibujar los Orbitales moleculares obtenidos mediante el cálculo MOPAC que corresponden con las interpretaciones siguientes, indicando su energía en Kcal/mol.

