

Práctica 20: Isomería Constitucional

1.- Dibujar y minimizar todos los isómeros posibles de fórmula molecular C_3H_6O .

2.- Realizar el cálculo vibracional de cada una de las moléculas encontradas y en base a los siguientes datos espectroscópicos completar la tabla siguiente:

A IR(cm^{-1}): 2977-2973, 2878-2877, 1723, 1436-1421, 1394-1325.

B IR(cm^{-1}): 2966-2946, 2898-2871, 2818, 1752.

C IR(cm^{-1}): 3680, 3107, 3009, 3044, 2957, 2904.

D IR(cm^{-1}): 3109, 3045, 3011, 2976-2970, 2873, 1648, 1491, 1467-1452, 1429, 1181.

E IR(cm^{-1}): 3104-3002, 2974, 2973, 2877, 1679, 1441, 1366*.

F IR(cm^{-1}): 2994, 2986, 2925, 2907, 1345*, 1308, 1264.

G IR(cm^{-1}): 3684, 3163-3077*, 2998*, 2983*, 1490-1391*, 1350*, 1280*.

| | NOMBRE | E_p (kcal/mol) | ΔH_f (kcal/mol) |
|---|--------|------------------|-------------------------|
| A | | | |
| B | | | |
| C | | | |
| D | | | |
| E | | | |
| F | | | |
| G | | | |