

September 14, 2020

Abstract

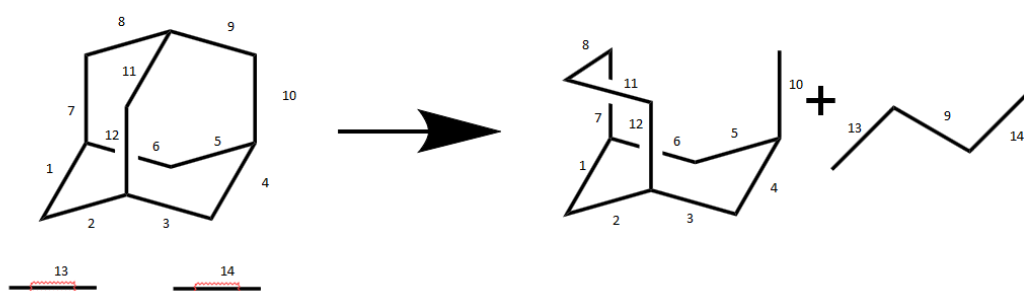
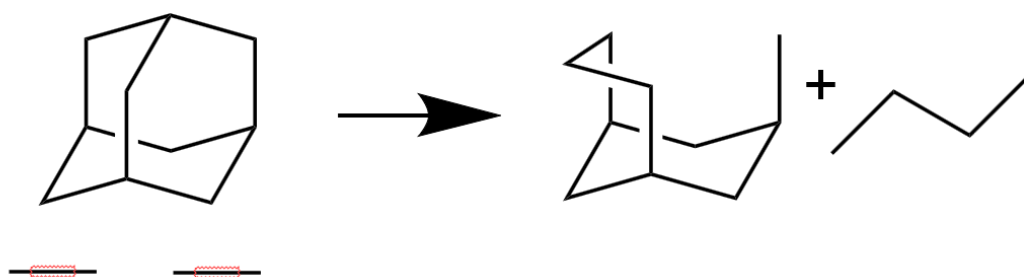
1 Actividades realizadas

Las actividades que ya fueron realizadas son las siguientes:

Nombre	Optimización		Entalpias		Capacidad calorífica	Puntos críticos	Análisis de conformeros
	B3LYP	G4	NIST	TAJTI			
Adamantano	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Ácido adamantanacético	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
Ácido adamantancarboxílico	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
adamantil-isocianato	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
adamantil-isotiocianato	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
1-adamanmetanol	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
1-adamanetanol	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
3-amino-1-adamantanol	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
1-acetiladamantano	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
amantadina	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Conformeros encontrados:

Nombre	Conformeros encontrados
1-adamantanetanol	2
1-adamantanmetanol	2
ac_adamantanacético	4
ac_adamantilcarboxílico	2



Parte de la ecuación	Número de enlaces C-C
Reactivos	14
Productos	14