

1647  
MW

**C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O**

**3-Butyn-2-ol**

**C<sub>1</sub>** (conformers I and II)  
HC≡C–CH(OH)–CH<sub>3</sub>

$r_0$	Å	$\theta_0$	deg	
C(3)≡C(4)	1.206 <sup>a)</sup>		conformer I	conformer II
C(2)–C(3)	1.460 <sup>a)</sup>	C(1)–C(2)–C(3)	112.0(15)	110.5(15)
C(1)–C(2)	1.535 <sup>a)</sup>	C(1)–C(2)–O	108.1(15)	112.8(15)
C(2)–O	1.415 <sup>a)</sup>	H–C(3)≡C(4)	180.00 <sup>a)</sup>	
C(4)–H	1.060 <sup>a)</sup>	C(4)≡C(3)–C(2)	180.00 <sup>a)</sup>	
C(1)–H	1.093 <sup>a)</sup>	C(3)–C(2)–O	112.5 <sup>a)</sup>	
O–H	0.950 <sup>a)</sup>	C(3)–C(2)–H	109.47 <sup>a)</sup>	
		H–C(1)–H	109.47 <sup>a)</sup>	
		C(3)–C(2)–O–H	56(5) <sup>b)</sup>	45(5) <sup>b)</sup>

The conformer II is more stable than the conformer I by 0.4(4) kJ mol<sup>–1</sup>.

<sup>a)</sup> Assumed for both I and II conformers.

<sup>b)</sup> From *syn*.

Marstokk, K.-M., Møllendal, H.: Acta Chem. Scand., Ser. A **39** (1985) 639.

