

**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial**



**REVISIÓN DEL ESTUDIO CONFORMACIONAL DE ANILLOS SATURADOS DE 6 ÁTOMOS CON LIGANDOS QUELATO SIMÉTRICOS EN COMPLEJOS DE NÍQUEL, PALADIO Y PLATINO**

**Titulación:** Grado en Ingeniería Química

**Alumno:** Adrián García Ortiz

**Directores:** Luis García González  
José Pérez Pérez

Cartagena, septiembre de 2014



**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial**



**REVISIÓN DEL ESTUDIO CONFORMACIONAL DE ANILLOS SATURADOS DE 6 ÁTOMOS CON LIGANDOS QUELATO EN COMPLEJOS DE NÍQUEL, PALADIO Y PLATINO**

**Titulación:** Grado en Ingeniería Química

**Alumno:** Adrián García Ortiz

**Directores:** Luis García González  
José Pérez Pérez

Cartagena, septiembre de 2014

# **REVISIÓN DEL ESTUDIO CONFORMACIONAL DE ANILLOS SATURADOS DE 6 ÁTOMOS CON LIGANDOS QUELATO EN COMPLEJOS DE NÍQUEL, PALADIO Y PLATINO**

Memoria presentada en la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial de la Universidad Politécnica de Cartagena para optar al Grado de Ingeniería Química

**Adrián García Ortiz**



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MINERA,  
GEOLÓGICA Y CARTOGRÁFICA

---

ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA

**D. Luis García González y D. José Pérez Pérez**, Profesores del Área de Química Inorgánica de la Universidad Politécnica de Cartagena, como **directores del Trabajo Fin de Grado** titulado: **“Revisión del estudio conformacional de anillos saturados de 6 átomos con ligandos quelato simétricos en complejos de níquel, paladio y platino”**

**HACEN CONSTAR:**

Que el mencionado Trabajo, ha sido realizado por el alumno **ADRIÁN GARCÍA ORTIZ**, en el Departamento de Ingeniería Minera, Geológica y Cartográfica, Área de Química Inorgánica.

Cartagena, septiembre de 2014

Fdo.: Luis García González

Fdo.: José Pérez Pérez

## AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer este Trabajo Fin de Grado al señor D. Luis García González, el que una vez más, se ha involucrado mucho y me ha enseñado muchas cosas a nivel profesional y personal.

Ha sido un auténtico placer trabajar con usted.



# ÍNDICE

	Página
<b>I.- INTRODUCCIÓN</b>	
I.1.- Introducción .....	1
I.2.- Ángulos de torsión .....	8
I.3.- Resumen del PFC del año 2009 .....	11
I.4.- Objetivos y estructuración del trabajo.....	48
 <b>II.- METODOLOGÍA</b>	
II.1.- Medios a utilizar.....	1
II.1.1.- Base de Datos CSD .....	1
II.1.1.1.- Programa <i>ConQuest</i> .....	2
II.1.1.2.- Programa <i>Mercury</i> .....	5
II.1.2.- Programas específicos.....	9
II.1.2.1.- Métodos Bayesianos para la clasificación conformacional de anillos de seis miembros.....	9
II.1.2.2.- Método para la asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas.....	13
II.1.3.- Las 6 conformaciones del ciclohexano generadas por el programa <i>Hyperchem</i> <sup>TM</sup> .....	16
II.2.- SELECCIÓN DE LAS ESTRUCTURAS.....	18
Bibliografía II.....	20
 <b>III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>	
III.1.- Aplicación del Método de Clasificación.....	1
III.2.- Estudios de las estructuras obtenidas con la condición de la búsqueda <i>any</i> .....	41
 <b>IV.- CONCLUSIONES.....</b>	 <b>1</b>



## I.1.- INTRODUCCIÓN

Este Trabajo Fin de Grado es la continuación del Proyecto Fin de Carrera llevado a cabo por el mismo autor en 2009 titulado “Estudio conformacional de anillos saturados de 6 átomos con ligandos quelato simétricos en complejos de níquel, paladio y platino”, que a su vez, lo era del desarrollado en 2007 por África Alcolea López “Estudio estructural de anillos de 6 miembros de diaminas de cobalto(III)”. Los antecedentes de estos estudios son:

- Las conformaciones de anillos orgánicos de seis miembros se investigan desde hace más de un siglo [Sachse, 1890].
- Existe un gran número de diferentes métodos para describir las conformaciones disponibles para anillos de seis miembros [Hendrickson, 1967].
- Se han utilizado varios algoritmos de *clustering* diferentes, aplicados al espacio torsional, en el análisis conformacional de carbociclos de seis miembros [Allen, 1991; Taylor, 1994].
- Se han calculado las diferencias de energía potencial entre varias conformaciones de carbociclos de seis miembros [Allinger, 1969; Dasgupta, 1995] y se han sintetizado conformaciones de alta energía [Columbus, 1994; Sieburth, 1994]

Los autores utilizan las conformaciones que adopta el ciclohexano según la publicación de Hendrickson del año 1967, señalada anteriormente, en la que se describe el mapa esférico de energía que se recoge en la Figura 1:

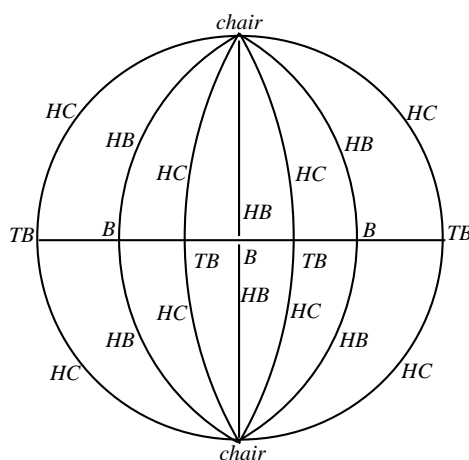


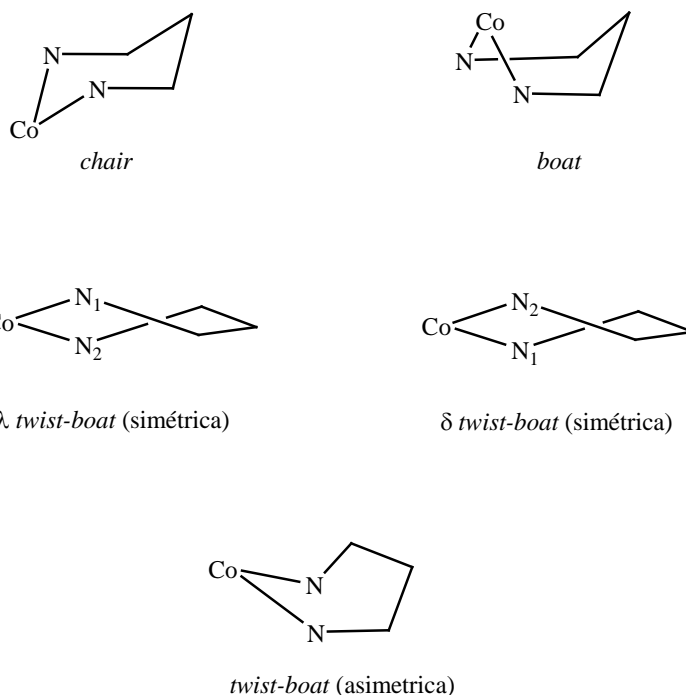
Figura 1.- Mapa esférico de energía

En este mapa faltan dos conformaciones: *envelope* y *screw-boat*, que estudiaremos más adelante. Describe una conformación *half-boat*, HB, que hoy día no existe.

La explicación del mapa es sencilla: los dos polos de la esfera corresponden a las conformaciones *chair*, mientras que las conformaciones *twist-boat* y *boat* se sitúan en el ecuador. Los cambios pseudorotacionales de las conformaciones se representan horizontalmente (latitudinalmente) y los cambios simétricos verticalmente (longitudinalmente). Las barreras de energía a lo largo de la ruta pseudorotacional, entre las conformaciones *twist-boat* y la *boat* de más alta energía, son muy bajas, mientras que las barreras longitudinales entre las conformaciones *chair* y *boat* o *twist-boat* son más altas que las latitudinales y de altura comparable una a otra [Strauss, 1971]. Las dos posiciones *chair* en los polos y las seis *twist-boat* ecuatoriales son de mínima energía, mientras que las conformaciones *boat* son mínimas entre las dos formas *chair* (longitudinalmente) pero a caballo entre las conformaciones *twist-boat* (latitudinalmente).

Es obvio que la energía y propiedades simétricas del ciclohexano descritas anteriormente no son necesariamente válidas para los anillos inorgánicos de seis miembros.

Hay un estudio [Hambley, 1982] de las posibles conformaciones de complejos de 1,3- propanodiamina. En él, las conformaciones más comunes adoptadas por los anillos quelato de seis miembros se muestran en la Figura 2:



**Figura 2.- Conformaciones de anillos de seis miembros**

Estudios de átomos de cobalto coordinados a un anillo simple de propanoamina mostraron que la conformación *chair* es la preferida, por unos 12 kJ/mol, respecto a las formas *twist-boat* y que la mayoría de las tensiones en estas últimas son causadas por deformaciones torsionales [Gollogly, 1972; Niketic, 1973]. En complejos del tipo  $[\text{Co}(\text{tn})_3(\text{X})_4]$ , donde  $\text{tn}=1,3$ -propanodiamina y X es un ligando pequeño, el 1,3- diaminopropano adopta una conformación *chair*. La barrera de energía en la interconversión  $\text{chair} \rightarrow \text{twist-boat} \rightarrow \text{chair}$  es de 24 kJ/mol [Gollogly, 1972].

Las energías relativas de las diferentes conformaciones adoptadas por los complejos  $[\text{Co}(\text{tn})_3]^{3+}$  son mucho más cercanas y hay alguna discrepancia sobre la conformación de energía más baja. Gollogly y Hawkins calcularon que la conformación de más baja energía era la *chair* mientras que Geue y Snow [Geue, 1971] predijeron la conformación *twist-boat*. No obstante, ambos cálculos estaban incompletos porque no consideraban la posibilidad de un complejo que contuviera ambas conformaciones *twist-boat* y *chair* en diferentes anillos.

Posteriormente, Niketic y Woldbye [Niketic, 1973] concluyeron que tal complejo “mixto” se localiza en el mínimo global.

Análisis de mecánica molecular de complejos de (2,4-pentanodiamina)cobalto mostraron que la forma *twist-boat*, en la que ambos grupos metilo están en posición ecuatorial, es la favorecida respecto al conformero *chair* por 8.3 kJ/mol [Hambley, 1981]. Aún cuando el conformero *chair* está favorecido sobre las formas *twist-boat* sobre la base de las interacciones diédricas, sus altamente tensionados ángulos de valencia y altas energías de interacciones de no-enlace dan como resultado una más alta energía de tensión que la calculada para las *twist-boats*.

Rasmussen y colaboradores, han cristalizado y analizado por mecánica molecular un número de complejos de propanodiaminacobalto(III) con coligandos etilendiamina y butanodiamina [Niketic, 1976]. Ellos han encontrado que el anillo *twist-boat* propanodiamina tiene unos 6-10 kJ/mol más de energía de tensión intraquelato que la forma *chair*, lo cual se relaciona con la preferencia observada de conformaciones *chair* en complejos menos llenos.

El Proyecto fin de Carrera de África Alcolea se basaba en un artículo de DaCruz y Zimmer, publicado en 1996, en el que utilizando la función *quest* de la CSD, los autores encontraron y salvaron todas las estructuras que contenían cobalto(III) unido a propanodiamina y derivados de la propanodiamina, donde ambos nitrógenos y todos los carbonos del anillo están hibridados  $sp^3$ , como se ve en la Figura 3:

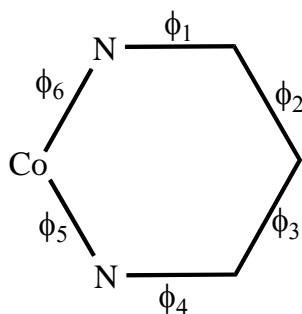


Figura 3

La búsqueda la efectuaron con la versión 5.07 de la CSD de abril de 1994, que contenía 120481 estructuras. Todas las estructuras se realizaron con factores R menores que 10.00. Obtuvieron un total de 180 compuestos (*refcode*). Eliminaron todos los átomos no pertenecientes a anillos de seis miembros de diaminas de cobalto(III), y cada anillo de seis miembros lo llevaron a un gran archivo. Renumeraron los átomos de forma consistente y obtuvieron un archivo con 208 anillos (muchas estructuras contenían más de un anillo de seis miembros, por lo que había más anillos de seis miembros, fragmentos, que estructuras de cobalto(III), compuestos). Con algunas consideraciones más llegaron a los resultados.

Los algoritmos que utilizaron intentaban encontrar agrupamientos en los que las similitudes dentro de un grupo fueran significativamente más grandes que entre distintos grupos. Dentro de los muy diferentes métodos de *clustering*, ellos utilizaron el Método Jerárquico *singlelink clustering* que es de tipo aglomerativo, lo que significa que se parte de conformaciones separadas que se unen en *clusters*. Si un par conformaciones están muy próximas en el espacio conformacional, se unen en un *cluster* (*single link*), y si el par de las conformaciones más cercanas están en *clusters* adyacentes, se fusionan (jerárquico). Aunque éste es un método efectivo de agrupar conformaciones, tiene su marcha atrás pues *clusters* separados pueden llegar a ser unidos por estructuras aisladas que hacen de puente entre los miembros más exteriores de los dos *clusters*

[Torda, 1994]. En este estudio agruparon conformaciones de anillos de seis miembros derivados de estructuras cristalinas y asumieron que éstas son las conformaciones de menor energía. Si las conformaciones de menor energía están separadas, por una barrera de energía grande, por ejemplo, la barrera entre las conformaciones *boat* y *chair*, la unión de *clusters* por las conformaciones más externas en *clusters* tipo *single-linkage* no son un problema. No obstante, si la barrera de energía es pequeña como es el caso entre las conformaciones *boat* y *twist-boat*, *clusters* separados pueden ser unidos por las conformaciones más externas que cruzan la barrera de energía y el agrupamiento *single-linkage* puede no ser el apropiado. Los autores demostraron que esto no era un problema en los anillos de seis miembros de diaminas de cobalto(III) y que este agrupamiento *single-linkage* puede distinguir entre las conformaciones idealizadas de anillos de seis miembros recogidos en una figura anterior.

Los resultados obtenidos fueron:

- 80% de conformaciones *chair* o *chair* deformadas (166/208). Con una energía media de 9.89 kJ/mol.
- 10% de  $\lambda$  y  $\delta$  *twist-boat* (21/208), 21.62 kJ/mol.
- 8% de *boat* (17/208), 59.75 kJ/mol.
- 2% de *twist-boat* asimétrica (4/208), 26.25 kJ/mol.

Como conclusión, los autores señalaban que este es el primer análisis de *clusters* de compuestos inorgánicos y afirman que no sólo es posible diferenciar conformaciones adoptadas por anillos de propanodiamina de cobalto(III) sino que también se puede distinguir entre conformaciones que se han formado por razones estéricas y aquellas que no alcanzan a formar *chairs* por razones estructurales.

Nosotros debemos añadir que en el estudio de África Alcolea, para los mismos *refcode* utilizados en esta publicación y con las mismas condiciones de búsqueda (factor  $R < 10$ ), encontramos 355 fragmentos. No teníamos datos concretos de cómo se llevó a cabo la depuración hasta los 208 fragmentos por lo que mantuvimos nuestra búsqueda con la finalidad de compararla con otra actualizada. Tampoco mereció la pena realizar comparaciones entre los métodos empleados por los autores y los nuestros ya que no coincidían siquiera el número de conformaciones que utilizaban como base del estudio. Para nosotros eran seis.

En el proyecto se mejoraron los medios de investigación y se ampliaron los datos objeto de estudio habida cuenta del tiempo transcurrido. Los medios utilizados, al-

gunos muy diferentes, fueron la de la base de datos Cambridge Structural Database, CSD, así como los programas *ConQuest* y *Mercury*, que se exponen en el siguiente Capítulo, al igual que los programas específicos elaborados por el Área de Química Inorgánica y el Departamento de Matemática Aplicada y Estadística (Dr. Mathieu Kessler).

Para enfocar adecuadamente el estudio conformacional de las diaminas de cobalto se abordó previamente el del ciclohexano con sus seis conformaciones: *chair*, *boat*, *twist-boat*, *envelope*, *half-chair* y *screw-boat*. Posteriormente se analizaron las rutas de interconversión del ciclohexano y se llevó a cabo la expansión de las configuraciones canónicas aplicadas a las diaminas de cobalto, elaborándose un esquema de interconversión entre ellos.

El siguiente paso fue la aplicación del Método de Clasificación a los compuestos obtenidos como resultado de la búsqueda realizada: 809 compuestos y 1816 fragmentos. El 42.2% de los fragmentos pertenecía a la configuración *chair*, seguido de la *boat* (24.5%), *twist-boat* (14.8%), *envelope* (10.7%), *half-chair* (4.1%) y *screw-boat* (3.7%). Una vez ampliadas a 15 las conformaciones canónicas se observó la presencia de sólo 13 estructuras **B1** frente a 432 **B2** cuando las **TB1** y **TB2** tenían una proporción más equilibrada: 154 frente a 114. Lo mismo sucedía con las conformaciones *envelope*: casi todas eran **E4** (170 frente a 9 **E2** y 15 **E3**). Estos datos experimentales resultaron ser consistentes con el diagrama teórico de rutas de interconversión obtenido anteriormente y, además, sugerían la presencia de nuevas rutas entre las conformaciones.

La aplicación del Programa del Área de Química Inorgánica de la UPCT permitió comprobar su buena fiabilidad al comparar sus resultados con los obtenidos por el Método de Clasificación al tiempo que calculaba el grado de deformación de las diaminas de cobalto: 15° de valor medio, lo que sugería que estos compuestos estaban poco deformados respecto a las conformaciones ideales del ciclohexano. Además, resultó de gran utilidad al confirmar la ausencia de la conformación **C1** en las nuevas rutas resultantes del estudio de los datos experimentales. Estas rutas, E-SB y E-HC, se confirmaron teóricamente para todos los casos posibles mediante una tabla de doble entrada con las 12 conformaciones *envelope* en ordenadas frente a las 12 *screw-boat* en abscisas (el estudio E-HC arroja los mismos resultados ya que la secuencia de valores de los ángulos de torsión en las conformaciones SB y HC es similar).

Finalmente, se aplicaron a los complejos tetra y pentacoordinados de diaminas de cobalto los métodos estadísticos elaborados por el Departamento de Matemática Aplicada y Estadística denominados Jerárquico y EM Clustering lo que permitió la clasificación en *clusters* de dichos compuestos. Los resultados más importantes se recogieron en el Capítulo de Conclusiones del Proyecto Fin de Carrera.

Un detalle final fue valorar el crecimiento del número de fragmentos: 335 en el año 1996, 1816 en el año 2006, con el detalle curioso de que la única conformación que varió su abundancia en el transcurso del tiempo fue la *chair*, con el 42.5% en ambos casos, destacando también el espectacular aumento de la *screw-boat* de 6 a 68 conformaciones.

El siguiente paso fue el Proyecto Fin de Carrera de Adrián García Ortíz, que ahora se revisa y amplía.

## I.2.- ÁNGULOS DE TORSIÓN

Frecuentemente, en la discusión de estructuras, son importantes los ángulos *interplanares* o *diedros*. Éstos son los ángulos formados entre las normales a dos planos. Como ejemplo, en la Figura 4 se consideran los planos (1), definido por los átomos 1, 2, 3 y 4, (2) definido por los átomos 1, 4, 5 y 8, y (3), definido por 5, 6, 7 y 8.

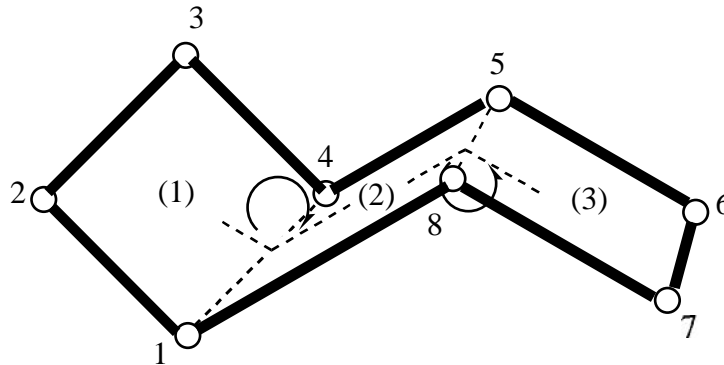


Figura 4

Un ángulo de *torsión* es un caso especial de ángulo diedro. Como se muestra en la Figura 5, el ángulo de torsión para los átomos 1, 2, 3, 4 es básicamente el ángulo entre los planos definidos por los átomos 1, 2, 3 y 2, 3, 4.

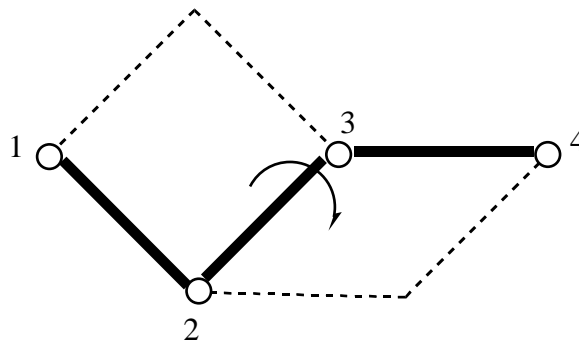


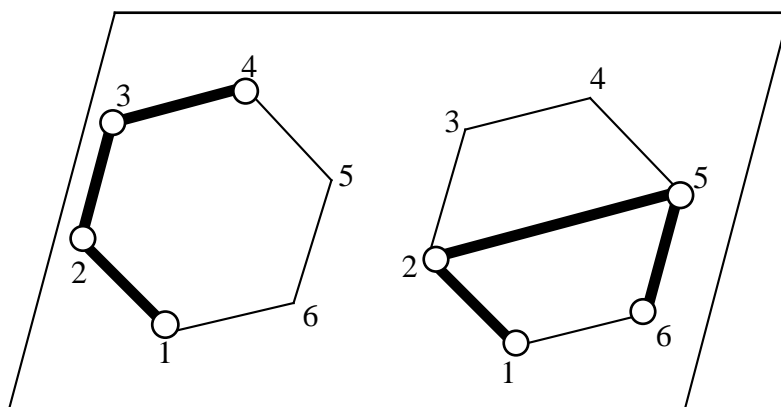
Figura 5

Alternativamente, se puede considerar como el ángulo entre los enlaces 1-2 y 3-4 proyectado sobre el plano normal al enlace 2-3, con el enlace 1-2 orientado hacia el observador (*proyección de Newman*). El ángulo de torsión es entonces el ángulo medido desde el átomo 1 hasta el átomo 4. Si está en el sentido de las agujas del reloj tiene signo positivo; en contra de las agujas del reloj, negativo. Este signo no cambia si la medi-



da se hace desde 4, 3, 2, 1 pero el ángulo de torsión tiene sentido contrario para la imagen especular del grupo.

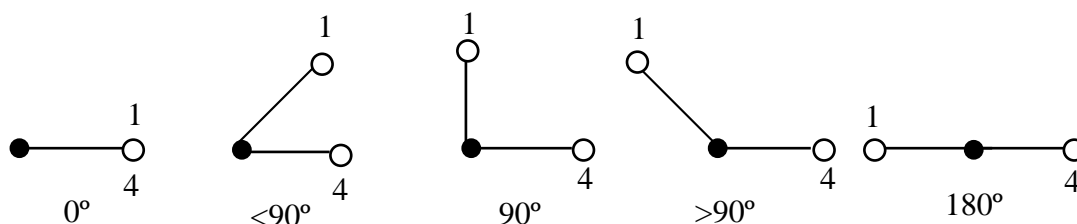
Si los átomos no están colocados de forma consecutiva en la estructura se denomina ángulo de torsión *impropio*. Como ejemplo, en la Figura 6, se muestra una estructura plana de seis átomos en la que se observan los dos casos mediante los ángulos de torsión 1, 2, 3, 4 y 1, 2, 5, 6.



**Figura 6**

Coloquialmente, el ángulo de torsión 1, 2, 3, 4 se mide como el ángulo que hay que girar alrededor del enlace 2–3 para que el átomo 1 eclipse al átomo 4.

Visto desde el eje formado por los átomos 2 y 3, es decir, desde el enlace 2–3, que representamos por un círculo, ●, los posibles casos para valores positivos son:



Como veremos a continuación un objetivo de este proyecto va a ser intentar clasificar por su estructura los compuestos estudiados. Como criterio utilizaremos la similitud de cada una de ellas con las 6 conformaciones canónicas del ciclohexano. Esta comparación se realizará, precisamente, mediante los ángulos de torsión.

En la Tabla 1 se recogen las 6 conformaciones del ciclohexano y sus ángulos de torsión característicos  $\tau_1$ - $\tau_6$  medidos en grados [Allen, 1991].

**Tabla 1.- Ángulos de torsión para las 6 conformaciones del ciclohexano**

Conformación	C	B	TB	E	HC	SB
$\tau_1$ (°)	60	0.0	33	30	45	40
$\tau_2$ (°)	-60	60	33	0.0	-15	0.0
$\tau_3$ (°)	60	-60	-70	0.0	0.0	-22
$\tau_4$ (°)	-60	0.0	33	-30	-15	0.0
$\tau_5$ (°)	60	60	33	60	45	40
$\tau_6$ (°)	-60	-60	-70	-60	-62	-60
Simetría	$D_{3d}$	$C_{2v}$	$D_2$	$C_s$	$C_2$	$C_2$

C: *chair*

B: *boat*

TB: *twist-boat*

E: *envelope*

HC: *half-chair*

SB: *screw-boat*

Para realizar estos dos últimos apartados se han utilizado las publicaciones siguientes: [Allen, 1996], [Sharpe, 1993], [Giralt, 1984], [Conklin, 1996].

**I.3.- RESUMEN DEL PROYECTO FIN DE CARRERA DEL AÑO 2009****El ciclohexano**

El ciclohexano,  $C_6H_{12}$ , es un anillo de seis miembros. Si su estructura fuera plana tendría un ángulo interno de  $120^\circ$ , inadecuado para la hibridación  $sp^3$  que presenta el carbono; además, todos los hidrógenos estarían eclipsados (Figura 7):

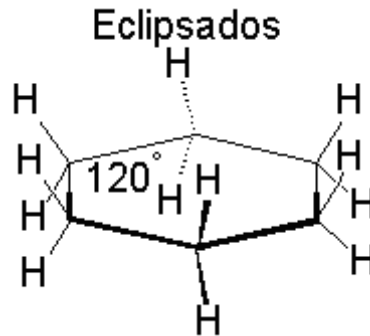


Figura 7

Su estructura es tridimensional y los ángulos internos presentan valores próximos a los ideales de la hibridación  $sp^3$  (Figura 8):

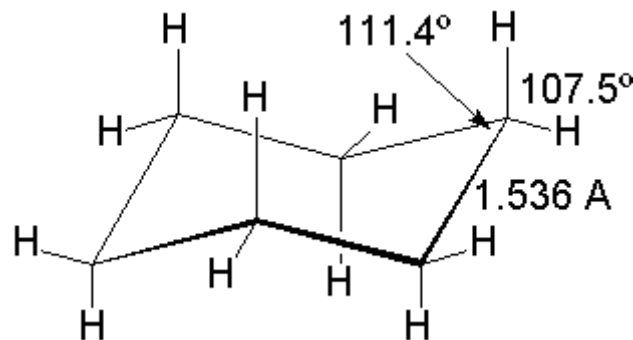
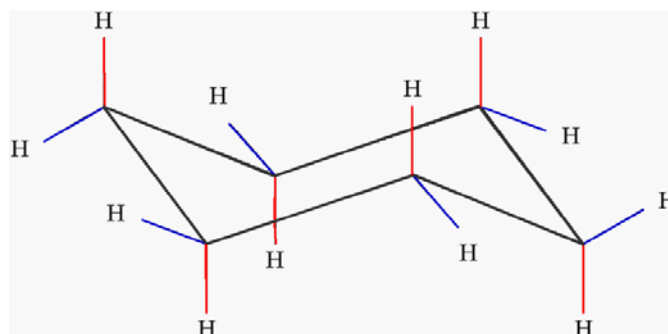


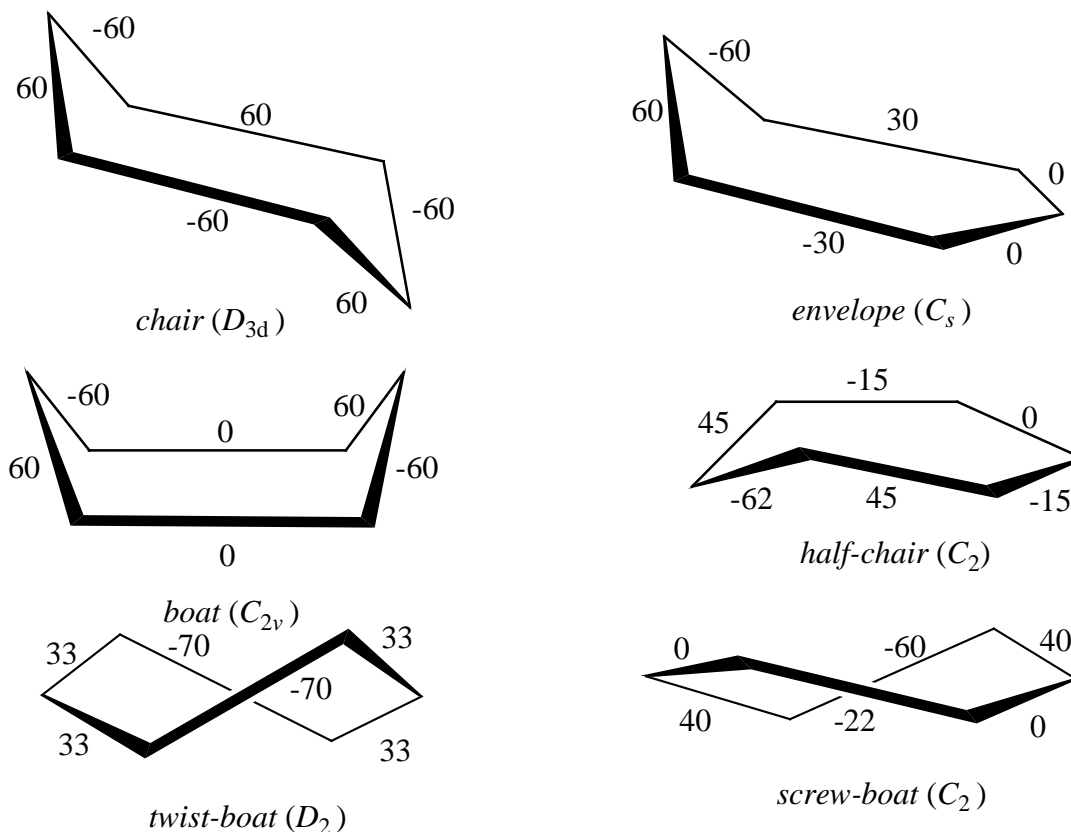
Figura 8

Para explicar la alternancia de las posiciones de los hidrógenos (axial y ecuatorial) utilizamos la conformación más estable: *chair* (silla). En la Figura 9, los hidrógenos axiales se representan con el enlace en color rojo y los ecuatoriales en azul:

Figura 9



El ciclohexano presenta seis conformaciones [Allen (1991)]: *chair* (C), *boat* (B), *twist-boat* (TB), *envelope* (E), *half-chair* (HC) y *screw-boat* (SB). La conformación *envelope* también se conoce como *half-boat*: es un intermedio de la *chair* y de la *boat*.



Estas distintas conformaciones se deben a que el ciclohexano está constituido por enlaces sencillos (es posible la rotación de los mismos), lo que da lugar a un equilibrio conformacional en el que la silla se invierte. En la Figura 10 se recoge la barrera de energía de las distintas conformaciones en la ruta de inversión de la silla en la que los hidrógenos axiales se convierten en ecuatoriales y viceversa:

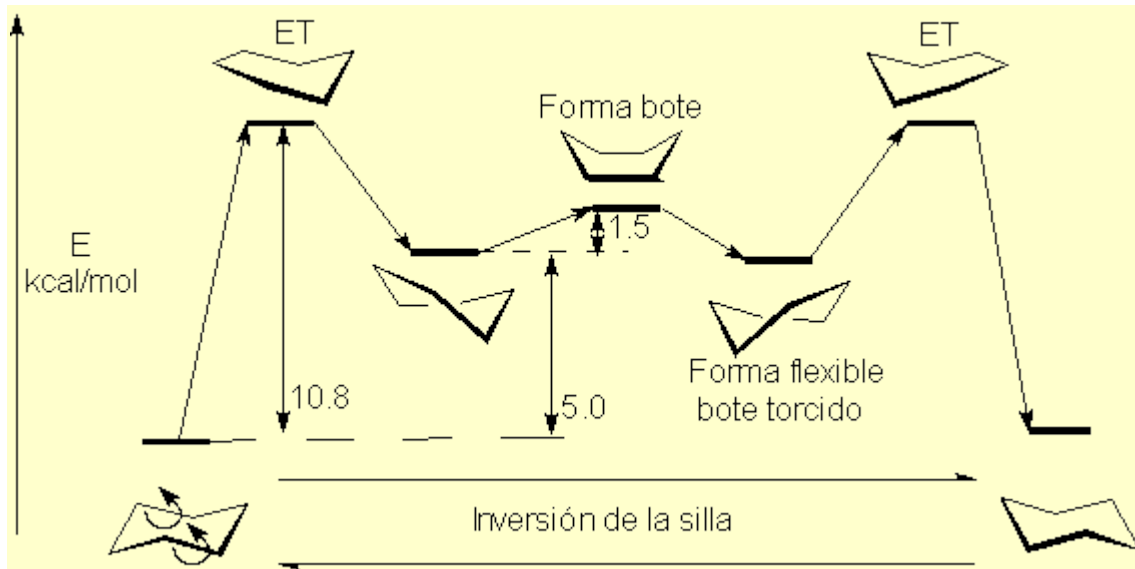


Figura 10

La inversión es especialmente relevante cuando el ciclohexano posee sustituyentes.

### Rutas de interconversión en el ciclohexano

Hendrikson [1967] describió tres rutas accesibles para la interconversión de las 10 conformaciones del ciclooctano:

<u>modo</u>	<u>símbolo</u>	<u>conversiones</u>
simétrico	S	CR ↔ CC ↔ BC CR ↔ TCC BC ↔ BB
pseudorotación	$\psi$	BB ↔ TB ↔ B TC ↔ C CC ↔ TCC BC ↔ TBC
asimétrico	a	BC ↔ TC

En el modo simétrico:

- Se mantiene un eje o plano
- Ángulos opuestos cambian de signo pasando por cero
- Barrera de energía alta.

En la pseudorotación:

- Todos los enlaces cambian los ángulos dihedros
- Si hay un eje  $C_2$  ( $S_4$ ) perpendicular, se mantiene siempre
- Los cambios de los ángulos de torsión son bajos.
- Barrera de energía baja.

La pseudorotación se puede describir como el paso de un anillo con un plano de simetría por un átomo a otro anillo con un eje que biseca al enlace adyacente a este átomo, o viceversa.

Las estructuras con un plano son máximos de energía.

Las estructuras con un eje son mínimos de energía.

En el ciclohexano, al igual que en el ciclooctano, se dan algunas de estas transformaciones para sus seis conformaciones. En la Figura 11 se recoge un esquema aclaratorio que las explica:

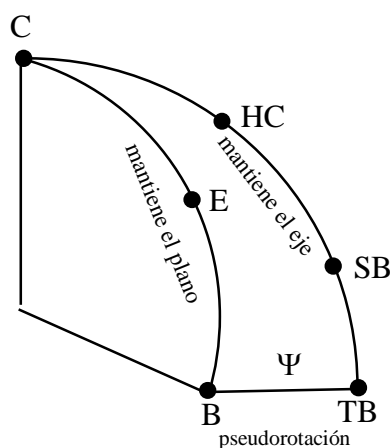


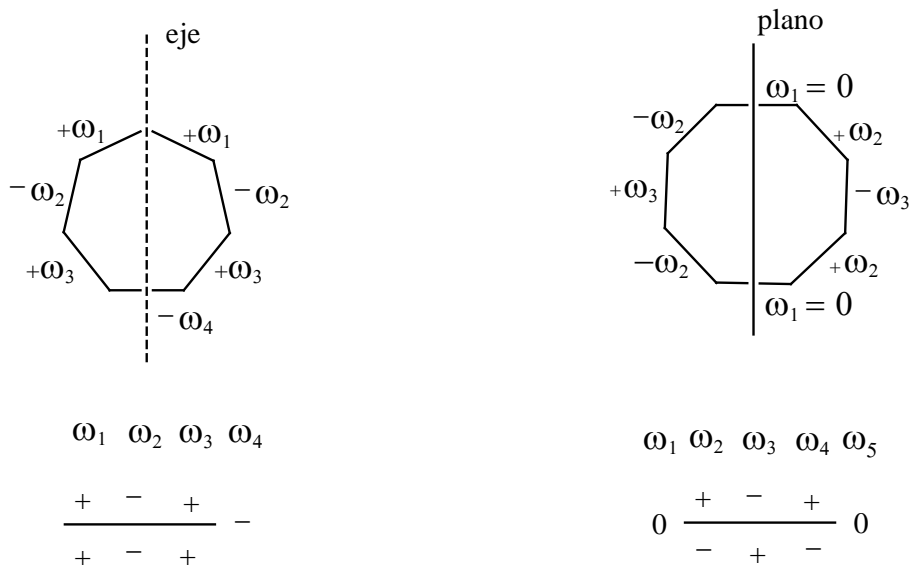
Figura 11.- Transformaciones de las conformaciones del ciclohexano

- $C \rightarrow E \rightarrow B$ , se mantiene, al menos, un plano
- $C \rightarrow HC \rightarrow SB \rightarrow TB$ , se mantiene un eje, ( $C_2$  en este caso)
- $B \rightarrow TB$ , hay pseudorotación.

El mismo autor estableció una convención con una serie de reglas con la finalidad de representar una simbología que facilitara la comprensión de estos conceptos.

En esta convención cualquier anillo simétrico se describe mediante un símbolo constituido por una línea horizontal de simetría que representa al elemento de simetría (plano o eje) que pasa a través del anillo, y por la secuencia cíclica de signos de los ángulos dihedros de los enlaces (+, 0, -) ordenados a su alrededor como en el anillo fisi-

co. Un átomo localizado sobre un plano o un eje se coloca arbitrariamente en la parte izquierda del símbolo. En las figuras siguientes se resumen ejemplos de símbolos y reglas para el uso de la convención:



- 1.- Enlaces opuestos a través del correspondiente elemento de simetría tienen ángulos diedros ( $\omega_1$ ,  $\omega_2$ , etc) iguales en magnitud e igual signo a través de un eje, pero de signo opuesto si es a través de un plano.
- 2.- El símbolo es equivalente al del plano físico y puede girarse en uno u otro sentido sin cambiar su identidad.
- 3.- Cuando un elemento de simetría biseca un enlace, el signo de su ángulo diedro aparece en las proximidades del final de la línea de simetría; debe ser cero (p.e. eclipsado) si la simetría es un plano.
- 4.- La imagen especular de un anillo se genera cambiando todos los signos; así debe mostrarse que un anillo con un plano es idéntico a su enantiómero mientras que un anillo con sólo un eje no lo es.
- 5.- Símbolos con tres o más signos iguales consecutivos no son anillos reales o son anillos muy elevadamente tensionados; estos casos sólo se consideran ocasionalmente cuando hay barreras de transición.
- 6.- Para la presentación lineal el símbolo se puede truncar parcialmente eliminando los signos que hay debajo de la línea de simetría; en este caso hay que prefijar la letra A para eje (axis) o P para plano con el fin de indicar el elemento de simetría. Esto implica que los signos eliminados en la parte de debajo de la línea de simetría están relacionados con los de la parte de arriba mediante la regla 1. Los signos de la parte de arriba de

las líneas se ponen entre paréntesis para distinguirlos de los que hay en los dos extremos, los cuales representan enlaces bisecados por el elemento de simetría. Así, los dos ejemplos de las figuras anteriores son, respectivamente, A (+ - +)- y P 0(+ - +)0.

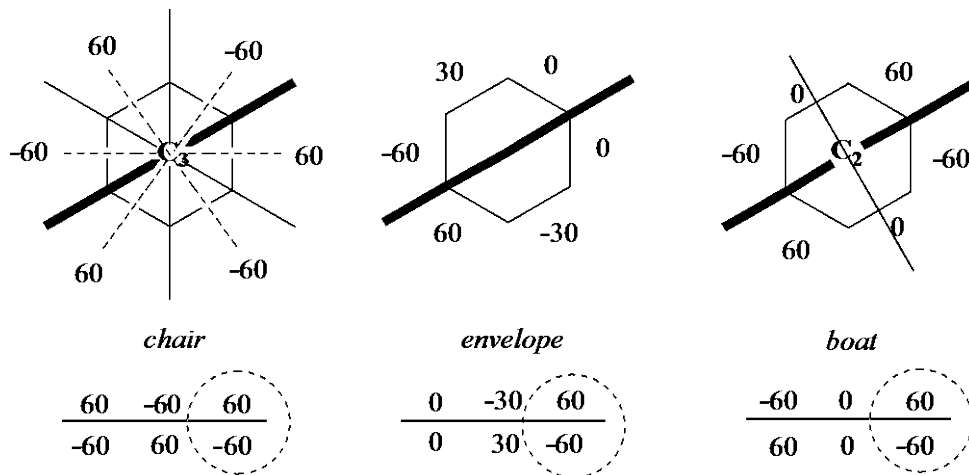
Para nuestros datos, los casos más frecuentes serán:

$$P \quad \frac{60 \quad -60 \quad 60}{-60 \quad 60 \quad -60} \qquad P \quad 0 \frac{60 \quad -60}{-60 \quad 60} 0$$

$$A \quad \frac{33 \quad -70 \quad 33}{33 \quad -70 \quad 33} \qquad A \quad -70 \frac{33 \quad 33}{33 \quad 33} -70$$

**Transformación**

**C** → **E** → **B** (mantiene el plano)



La secuencia es:

<b>C</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<table border="0"> <tr> <td><b>60</b></td> <td><b>-60</b></td> </tr> <tr> <td><b>60</b></td> <td><b>-60</b></td> </tr> <tr> <td><b>60</b></td> <td><b>-60</b></td> </tr> </table>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>
<b>60</b>	<b>-60</b>										
<b>60</b>	<b>-60</b>										
<b>60</b>	<b>-60</b>										
<b>E</b>	<b>30</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>-30</b>							
<b>B</b>	<b>0</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>0</b>							

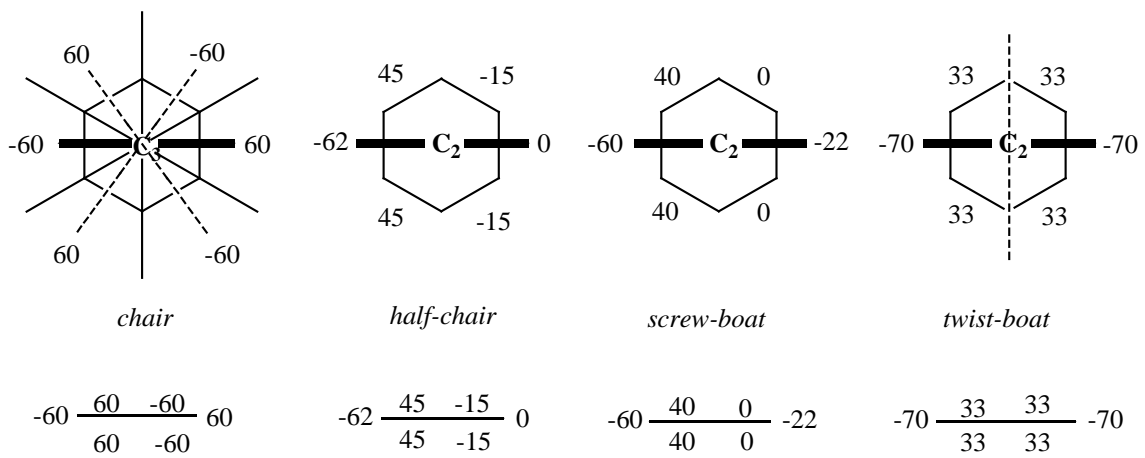
Por tanto, en esta transformación se mantienen dos valores de los ángulos de torsión para las tres conformaciones, 60 y -60, y los otros cuatro varían así:



$$\begin{array}{ccccc}
 \mathbf{C} & \longrightarrow & \mathbf{E} & \longrightarrow & \mathbf{B} \\
 60 & \dashrightarrow & 30 & \dashrightarrow & 0 \\
 -60 & \dashrightarrow & 0 & \dashrightarrow & 60 \\
 60 & \dashrightarrow & 0 & \dashrightarrow & -60 \\
 -60 & \dashrightarrow & -30 & \dashrightarrow & 0
 \end{array}$$

**Transformación**

**C**  $\longrightarrow$  **HC**  $\longrightarrow$  **SB**  $\longrightarrow$  **TB (mantiene el eje)**

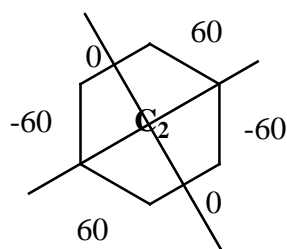


Observamos que mantiene el eje. Un ángulo de torsión varía de  $-60$  a  $-70$  y los otros cinco lo hacen paulatinamente:

<b>C</b>	<b>HC</b>	<b>SB</b>	<b>TB</b>
<b>60</b>	<b>45</b>	<b>40</b>	<b>33</b>
<b>-60</b>	<b>-15</b>	<b>0</b>	<b>33</b>
<b>60</b>	<b>0</b>	<b>-22</b>	<b>-70</b>
<b>-60</b>	<b>-15</b>	<b>0</b>	<b>33</b>
<b>60</b>	<b>45</b>	<b>40</b>	<b>33</b>
<b>-60</b>	<b>-62</b>	<b>-60</b>	<b>-70</b>

## Transformación

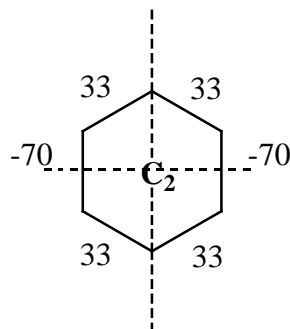
$\mathbf{B} \xrightarrow{\psi} \mathbf{TB}$  (pseudorrotación)



*boat*

$$0 \begin{array}{cc} 60 & -60 \\ -60 & 60 \end{array} 0$$

$$\begin{array}{ccc} -60 & 0 & 60 \\ \hline 60 & 0 & -60 \end{array}$$



*twist-boat*

$$-70 \begin{array}{cc} 33 & 33 \\ 33 & 33 \end{array} -70$$

$$\begin{array}{ccc} 33 & -70 & 33 \\ \hline 33 & -70 & 33 \end{array}$$

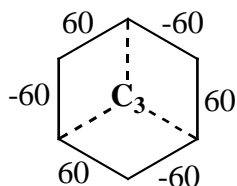
Mantiene el eje  $C_2$  (perpendicular al plano de la molécula) y los dos planos que presenta la conformación boat se convierten en dos ejes  $C_2$  en la twist-boat.

<b>B</b>	<b>TB</b>
<b>0</b>	<b>33</b>
<b>60</b>	<b>33</b>
<b>-60</b>	<b>-70</b>
<b>0</b>	<b>33</b>
<b>60</b>	<b>33</b>
<b>-60</b>	<b>-70</b>

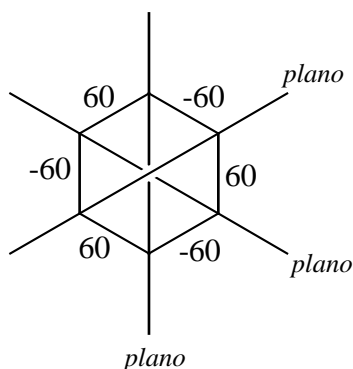
Observamos que mantiene, aproximadamente, dos valores, que sólo varían de  $-60$  a  $-70$  y los otros cuatro aumentan y disminuyen alternativamente:  $0 \rightarrow 33$ ;  $60 \rightarrow 33$ ;  $0 \rightarrow 33$  y  $60 \rightarrow 33$ .

### Simetría de las distintas conformaciones

En el Capítulo I se recogieron los distintos grupos puntuales y sus correspondientes elementos de simetría. Aplicando estos conceptos a las diferentes conformaciones del ciclohexano podemos razonar de qué tipo son. Así, la conformación *chair* es  $D_{3d}$  porque tiene:

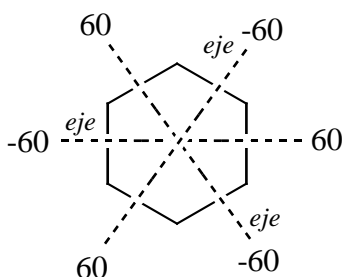


un eje  $C_3$  perpendicular al plano de la molécula



tres planos, cada uno de los cuales pasa por dos átomos de C opuestos

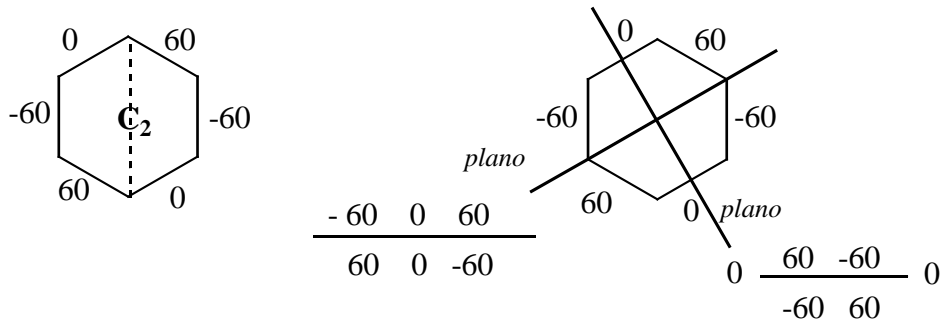
$$\begin{array}{ccc} 60 & -60 & 60 \\ \hline -60 & 60 & -60 \end{array}$$



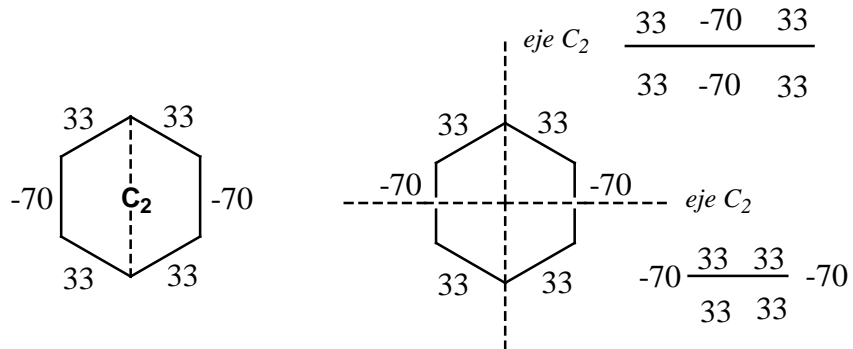
tres ejes  $C_2$ , cada uno de los cuales pasa por la mitad de un enlace C-C y por la mitad del enlace C-C opuesto

$$60 \quad \frac{-60 \quad 60}{-60 \quad 60} \quad -60$$

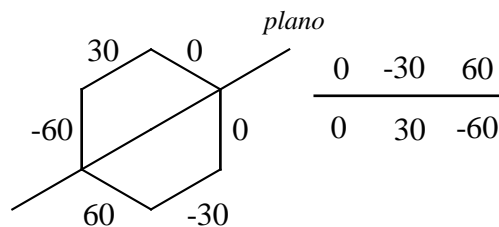
La conformación *boat* es  $C_{2v}$  porque tiene un eje  $C_2$  perpendicular al plano de la molécula y dos planos:



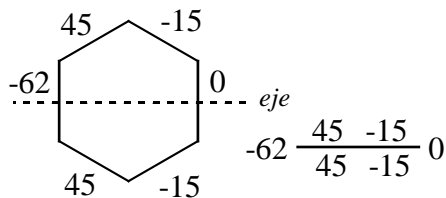
La conformación *twist-boat* es  $D_2$ , porque tiene un eje  $C_2$  perpendicular al plano de la molécula y dos ejes  $C_2$ :



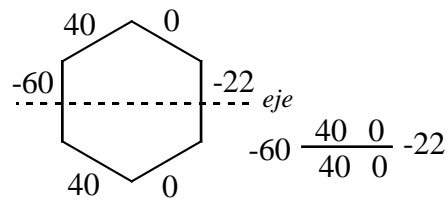
La conformación *envelope* es  $C_s$ , porque tiene un plano:



La conformación *half-chair* es  $C_2$ , porque tiene un eje  $C_2$ :



La conformación *screw-boat* es  $C_2$ , porque tiene un eje  $C_2$ :



### Expansión de las configuraciones canónicas del ciclohexano.

En el ciclohexano todos los átomos son iguales: carbono. Cabe la posibilidad de tener anillos de seis miembros con átomos distintos al carbono, incluso no ser carbono ninguno de ellos. Uno de los muchos sistemas químicos que presenta el ciclohexano es un heterociclo de metal (paladio y platino en nuestro caso) como el que se recoge en el esquema de la Figura 12 para las diaminas:

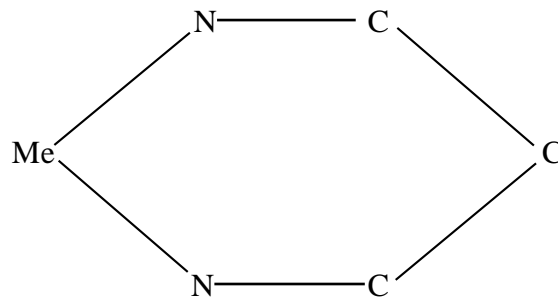
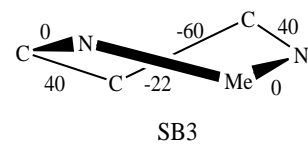
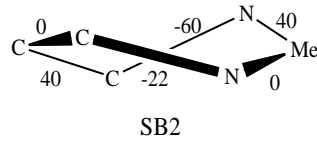
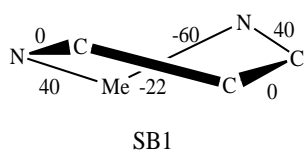
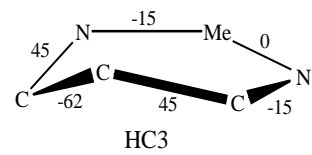
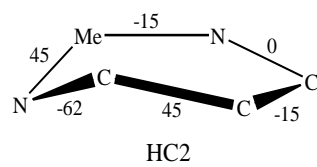
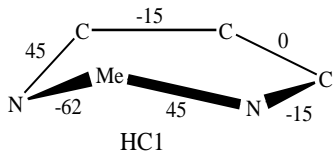
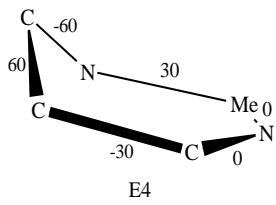
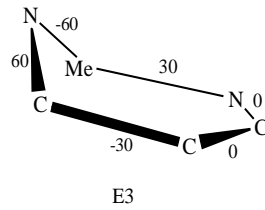
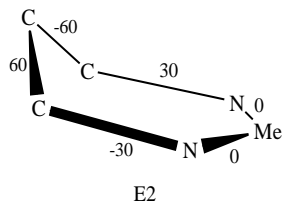
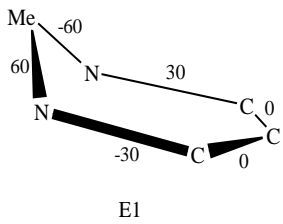
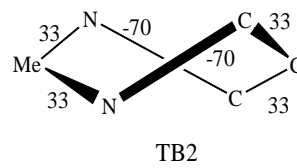
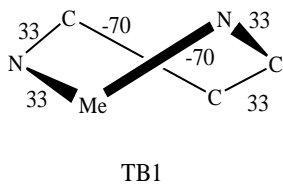
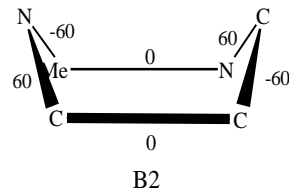
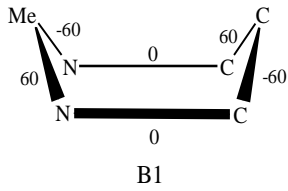
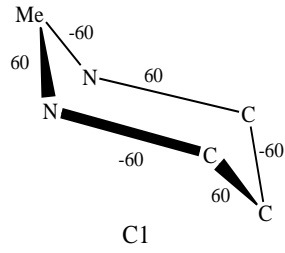


Figura 12.- diamina de metal

En este supuesto disminuye la simetría y aparecen nuevas conformaciones. En este caso el número de conformaciones aumenta hasta 15.



Otro de los sistemas químicos es el de un heterociclo de metal como el que se recoge en el esquema de la Figura 13:

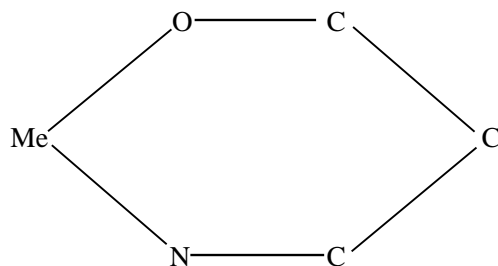


Figura 13.- quelato O,N de metal

En este supuesto disminuye tanto la simetría que las conformaciones expandidas, 25 en total, son todas  $C_1$ .

### Cálculo teórico (matemático)

En el sitio web [www.dmae.upct.es/ringconf](http://www.dmae.upct.es/ringconf) o bien en la aplicación *RingConf* de la pestaña denominada *Sistemas Cíclicos* se pueden expandir las conformaciones canónicas de un anillo de  $n$  miembros. Si lo hacemos para el primer caso, anillo de seis miembros N–Me–N–C–C–C, obtenemos:

$$C \rightarrow 60, -60, 60, -60, 60, -60$$

$$B \rightarrow 0, 60, -60, 0, 60, -60$$

$$B1 \rightarrow -60, 0, 60, -60, 0, 60$$

$$TB \rightarrow 33, 33, -70, 33, 33, -70$$

$$TB1 \rightarrow 33, -70, 33, 33, -70, 33$$

$$E \rightarrow 30, 0, 0, -30, 60, -60$$

$$E1 \rightarrow -60, 30, 0, 0, -30, 60$$

$$E2 \rightarrow -30, 60, -60, 30, 0, 0$$

$$E3 \rightarrow 0, -30, 60, -60, 30, 0$$

$$HC \rightarrow 45, -15, 0, -15, 45, -62$$

$$HC1 \rightarrow 45, -62, 45, -15, 0, -15$$

$$HC2 \rightarrow -15, 45, -62, 45, -15, 0$$

$$SB \rightarrow 40, 0, -22, 0, 40, -60$$

$$SB1 \rightarrow 40, -60, 40, 0, -22, 0$$

$$SB2 \rightarrow 0, 40, -60, 40, 0, -22$$

Para llegar a estas 15 conformaciones, deducidas matemáticamente mediante el programa diseñado por el profesor Kessler en el Departamento de Matemática Aplicada y Estadística, vamos a proceder comparando cada una de las seis conformaciones del ciclohexano con las que se van a formar al sustituir un átomo de carbono por uno de metal y los dos átomos de carbono adyacentes a éste por dos átomos de nitrógeno. Eliminaremos aquellas que sean equivalentes y debemos obtener las siguientes:

$$C \rightarrow 1$$

$$B \rightarrow 2$$

$$TB \rightarrow 2$$

$$E \rightarrow 4$$

$$HC \rightarrow 3$$

$$SB \rightarrow 3.$$

En total, 15 conformaciones.

De la misma manera, si lo hacemos para el segundo caso, anillo de seis miembros O–Me–N–C–C–C, obtenemos:

$$C \rightarrow 60, -60, 60, -60, 60, -60$$

$$B \rightarrow 0, 60, -60, 0, 60, -60$$

$$B1 \rightarrow -60, 0, 60, -60, 0, 60$$

$$B2 \rightarrow 60, -60, 0, 60, -60, 0$$

$$TB \rightarrow 33, 33, -70, 33, 33, -70$$

$$TB1 \rightarrow -70, 33, 33, -70, 33, 33$$

$$TB2 \rightarrow 33, -70, 33, 33, -70, 33$$

$$E \rightarrow 30, 0, 0, -30, 60, -60$$

$$E1 \rightarrow -60, 30, 0, 0, -30, 60$$

$$E2 \rightarrow 60, -60, 30, 0, 0, -30$$

$$E3 \rightarrow -30, 60, -60, 30, 0, 0$$

$$E4 \rightarrow 0, -30, 60, -60, 30, 0$$

$$E5 \rightarrow 0, 0, -30, 60, -60, 30$$

$$HC \rightarrow 45, -15, 0, -15, 45, -62$$

$$HC1 \rightarrow -62, 45, -15, 0, -15, 45$$

$$HC2 \rightarrow 45, -62, 45, -15, 0, -15$$

$$HC3 \rightarrow -15, 45, -62, 45, -15, 0$$

$$HC4 \rightarrow 0, -15, 45, -62, 45, -15$$



HC5  $\rightarrow$  -15, 0, -15, 45, -62, 45

SB  $\rightarrow$  40, 0, -22, 0, 40, -60

SB1  $\rightarrow$  -60, 40, 0, -22, 0, 40

SB2  $\rightarrow$  40, -60, 40, 0, -22, 0

SB3  $\rightarrow$  0, 40, -60, 40, 0, -22

SB4  $\rightarrow$  -22, 0, 40, -60, 40, 0

SB5  $\rightarrow$  0, -22, 0, 40, -60, 40

Para llegar a estas 25 conformaciones, procederemos como en el caso anterior, debiendo obtener las siguientes:

C  $\rightarrow$  1

B  $\rightarrow$  3

TB  $\rightarrow$  3

E  $\rightarrow$  6

HC  $\rightarrow$  6

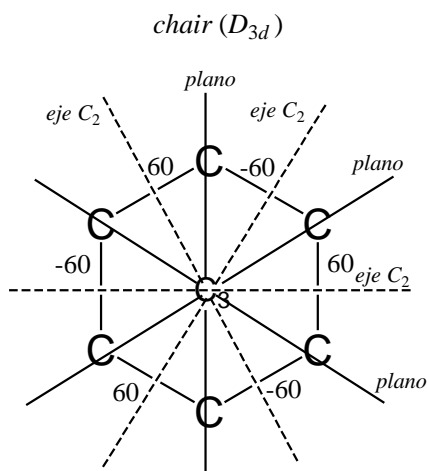
SB  $\rightarrow$  6.

En total, 25 conformaciones.

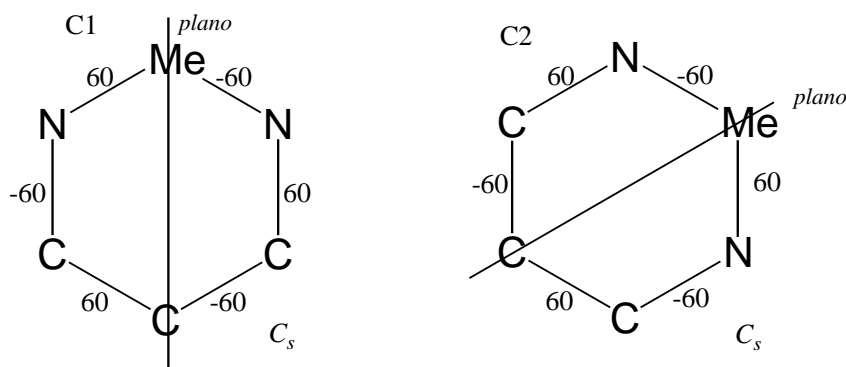
### Cálculo teórico (conformacional)

Comenzamos el desarrollo a partir de la conformación *chair* del ciclohexano. Al ser el primer caso que abordamos lo explicaremos, de forma didáctica, con profundidad. Con las restantes conformaciones procederemos de la misma forma pero sin comentarlas tan a fondo.

Primero presentamos la conformación y su simetría, *chair* y  $D_{3d}$  en este caso, con su secuencia de ángulos de torsión: 60, -60, 60, -60, 60, -60.

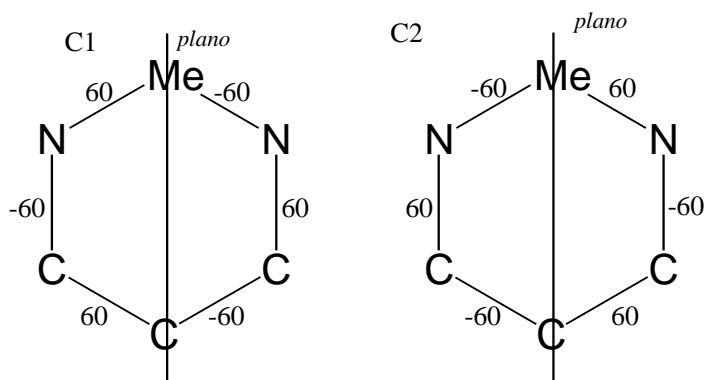


A continuación exponemos el *modus operandi*: mantener estos valores rotando la figura  $60^\circ$ . Nosotros lo haremos siempre con el átomo de cobalto, de manera que éste irá ocupando los diferentes vértices del hexágono. En este caso basta con recoger las dos primeras posiciones pues las demás son una mera repetición dada la secuencia  $60, -60$ .



Las dos conformaciones obtenidas, que denominábamos C1 y C2 cuando expusimos las 50 conformaciones posibles para este caso, presentan un plano que pasa por el átomo de Co y el C opuesto, por lo que su simetría es  $C_s$ . Es obvio señalar el gran descenso de simetría debido a la presencia de los átomos de Me y de N (dos) en el anillo del ciclohexano.

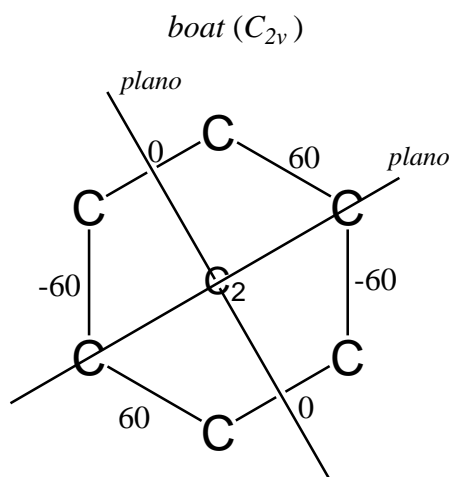
Ahora hay dos posibilidades: que ambas sean iguales o que sean distintas. Para comprobarlo utilizaremos los valores de los ángulos de torsión que rodean al átomo de cobalto. Por ello, colocaremos este átomo en la parte superior del hexágono, por lo que ahora son los valores de los ángulos de torsión los que varían:



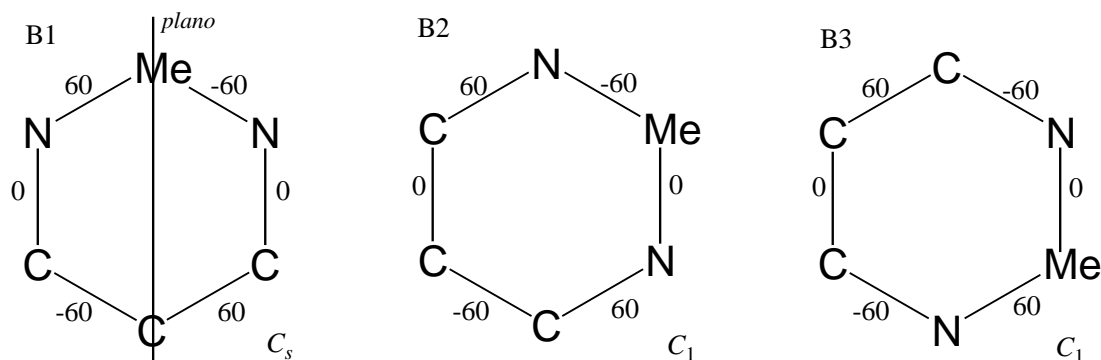
Se observa fácilmente que ambas conformaciones son iguales (una es la otra vista por detrás). Por tanto, como preveía el programa matemático sólo hay una conformación a la que denominaremos **C1**.

$$C1 = C2 \quad C1$$

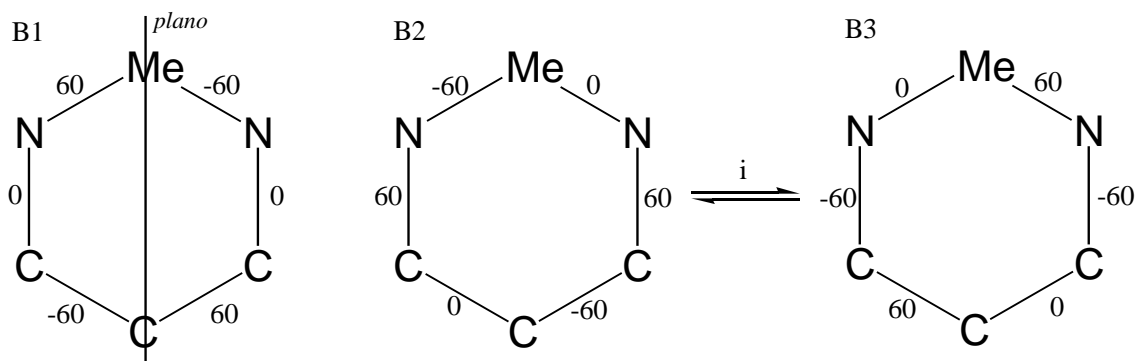
La segunda conformación que vamos a estudiar es la *boat*,  $C_{2v}$ , con una secuencia de ángulos de torsión 0, 60, -60, 0, 60, -60.



Ahora ponemos las tres primeras posiciones del átomo de cobalto (las otras tres son una simple repetición), denominadas B1, B2 y B3.

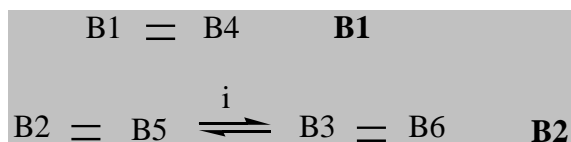


La conformación B1 es distinta a la B2 y B3 ya que presenta un plano que las otras dos no tienen. Para ver cómo son entre sí B2 y B3 recurrimos al método explicado anteriormente: colocar el átomo de cobalto en la parte superior del hexágono:



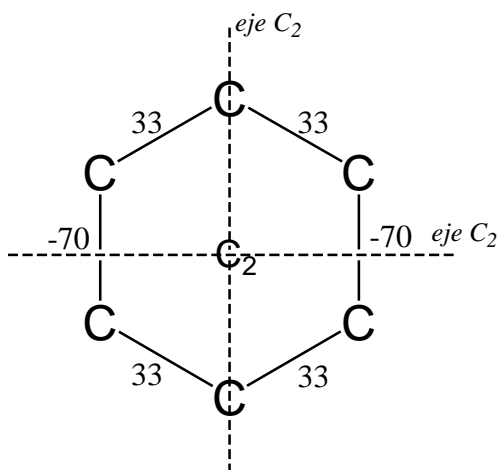
Se observa fácilmente que B3 es la imagen especular de B2.

Por tanto las seis conformaciones *boat* guardan la siguiente relación:

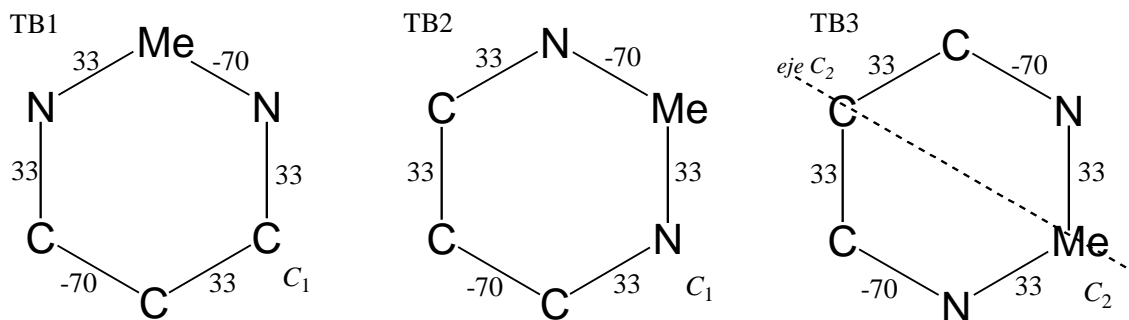


La conformación *twist-boat*,  $D_2$ , también tiene seis estructuras diferentes con ángulos de torsión 33, 33, -70, 33, 33, -70. El razonamiento es similar al anterior.

*twist-boat* ( $D_2$ )

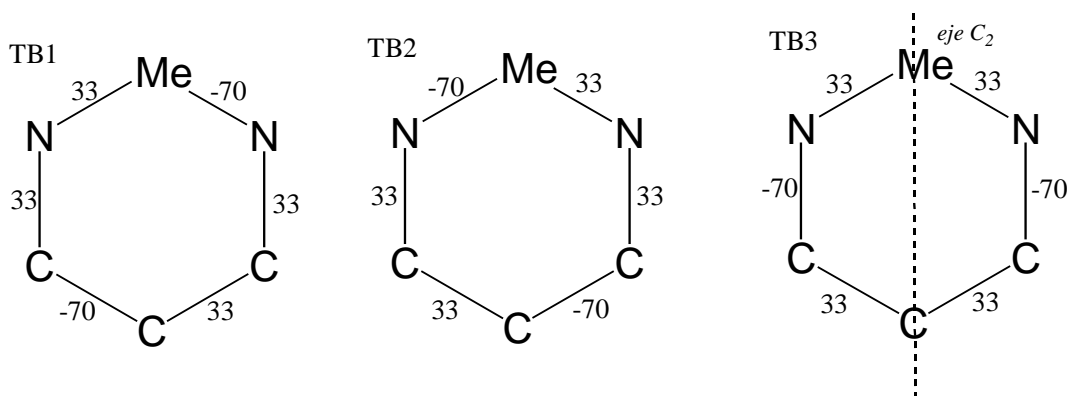


Las tres primeras conformaciones son:



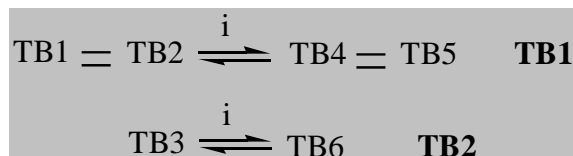
En este caso es la TB3 la que difiere de las otras dos.

Reordenando, tenemos:



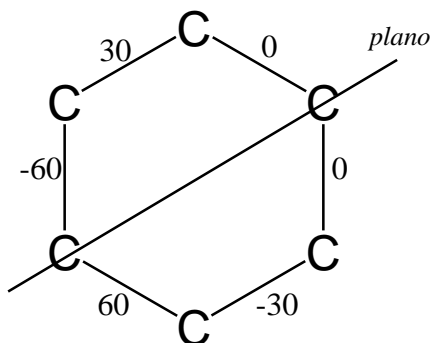
Se observa fácilmente que TB1 = TB2.

Como resumen, las conformaciones *twist-boat* guardan la siguiente relación:

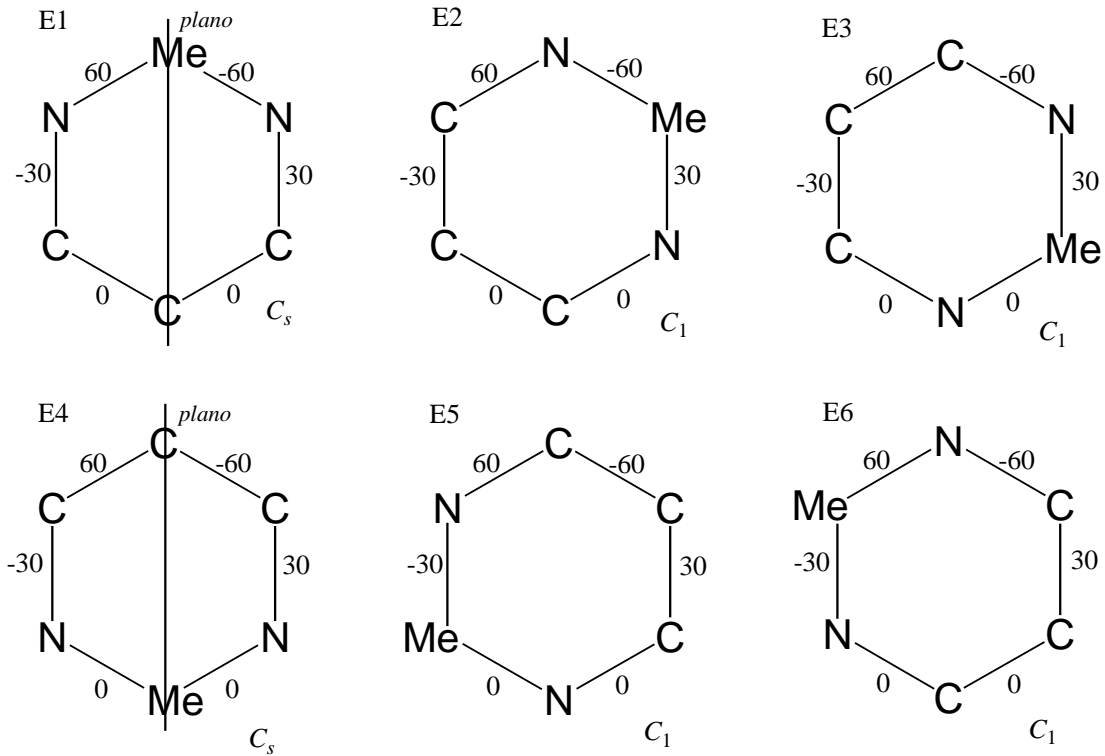


La conformación *envelope*,  $C_s$ , presenta doce conformaciones, seis con una secuencia en los ángulos de torsión de 30, 0, 0, -30, 60, -60 y otras seis con todos los signos cambiados.

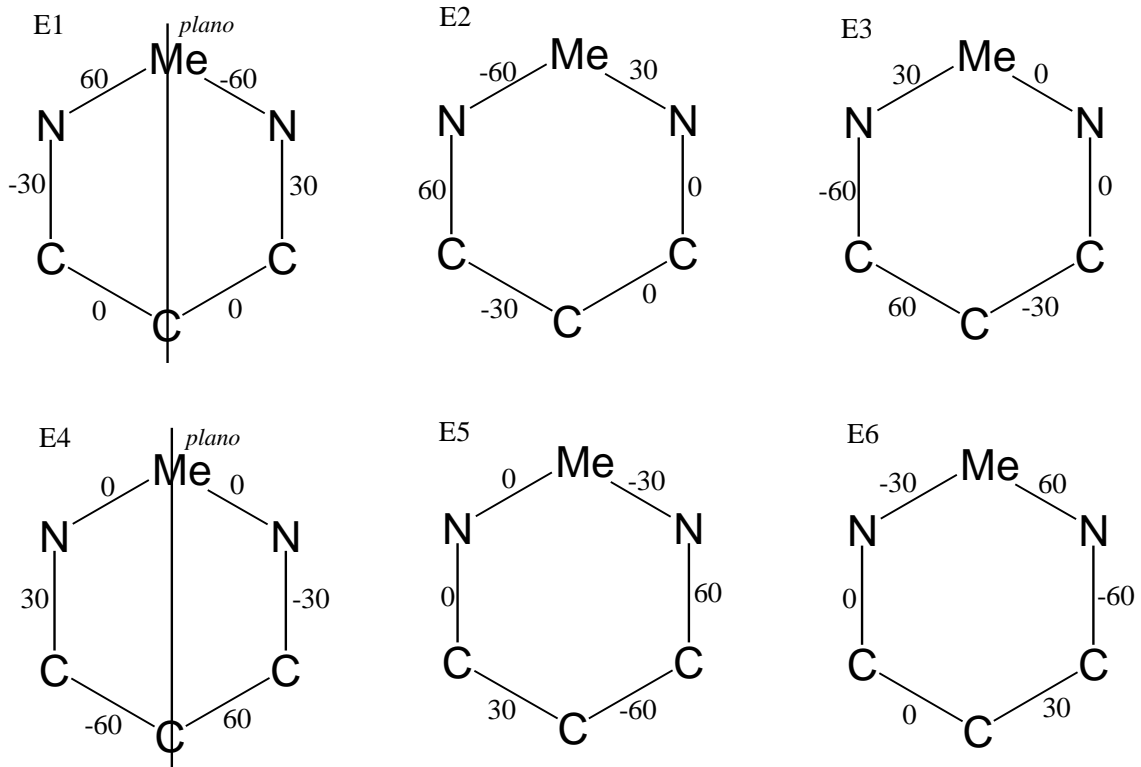
*envelope* ( $C_s$ )



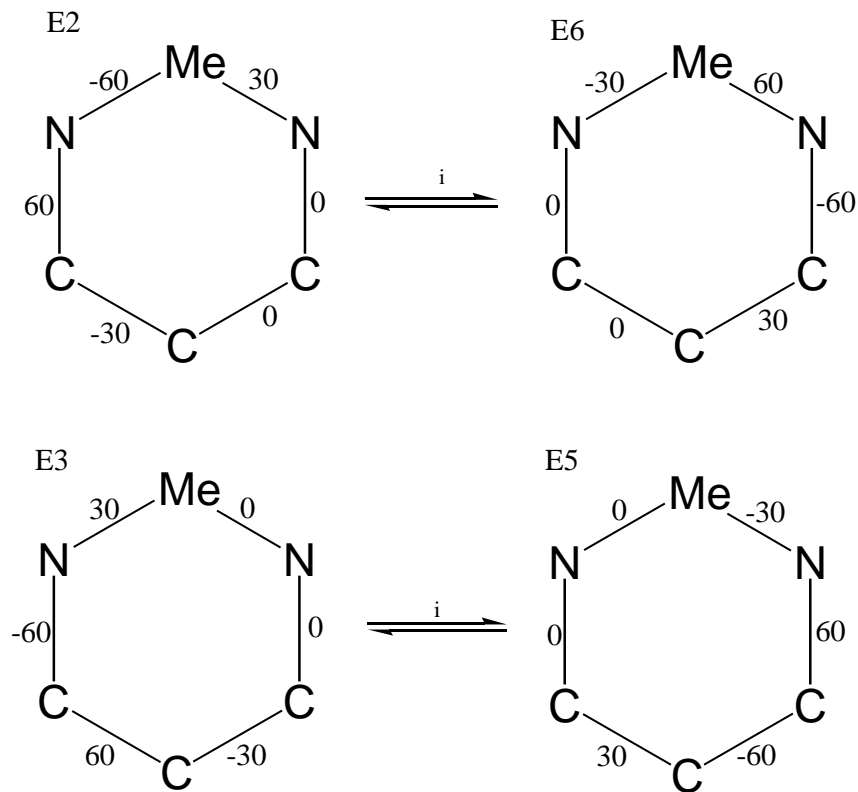
Ahora colocamos el átomo de cobalto en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión. Es obvio que se puede repetir para los otros seis casos.



Nos encontramos dos grupos de conformaciones, uno de simetría  $C_s$  (E1 y E4) y otro de simetría  $C_1$  (E2, E3, E5 y E6). Para ver la relación existente entre las distintas conformaciones reordenamos las estructuras:



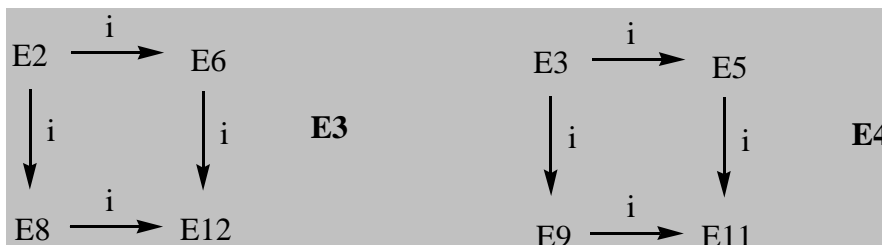
Las estructuras E1 y E4 son distintas pese a que tienen un plano que pasa por el átomo de cobalto ya que los ángulos de torsión que lo rodean son diferentes en cada caso. Por otro lado se observa fácilmente que



Si repetimos el proceso para las estructuras C7→C12, obtenemos el siguiente resultado

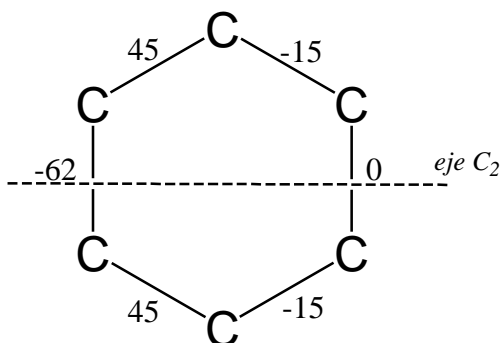
$$E1 = E7 \quad \mathbf{E1}$$

$$E4 = E10 \quad \mathbf{E2}$$



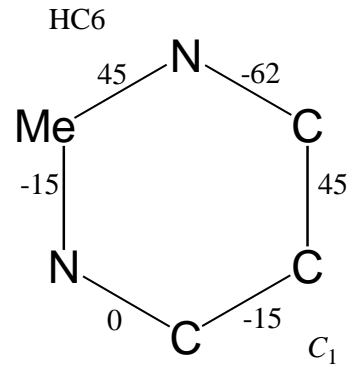
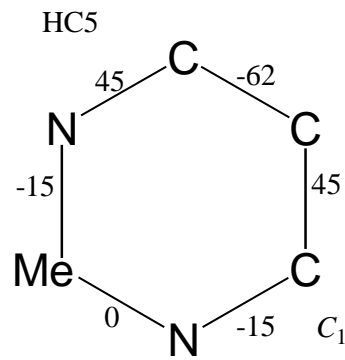
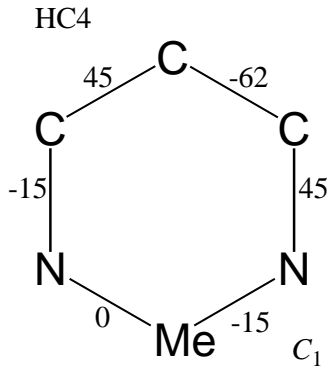
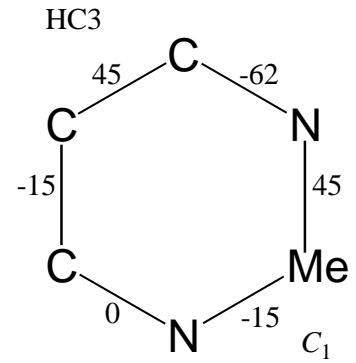
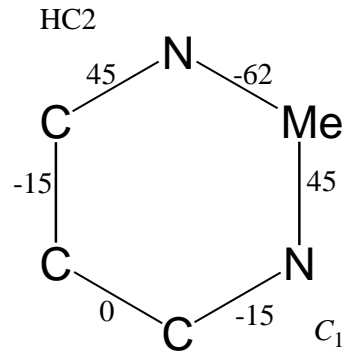
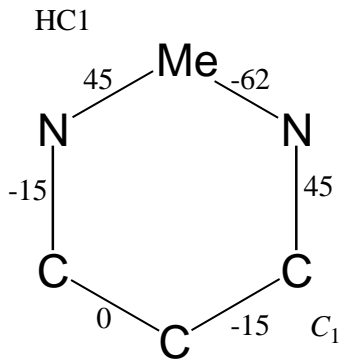
La conformación *half-chair*,  $C_2$ , presenta doce conformaciones, seis con una secuencia en los ángulos de torsión de 45, -15, 0, -15, 45, -62 y otras seis con todos los signos cambiados.

*half-chair* ( $C_2$ )

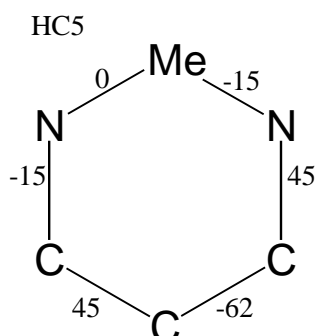
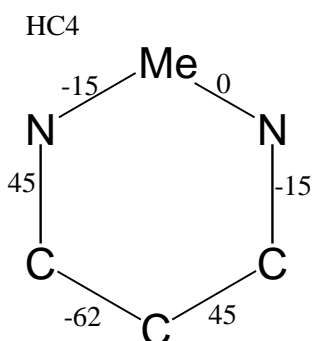
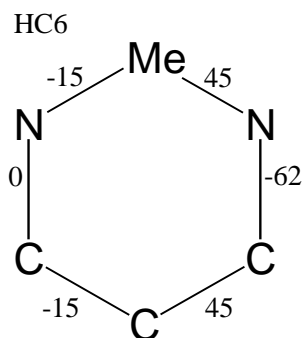
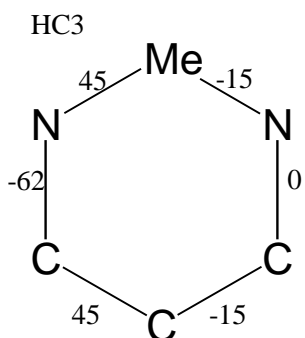
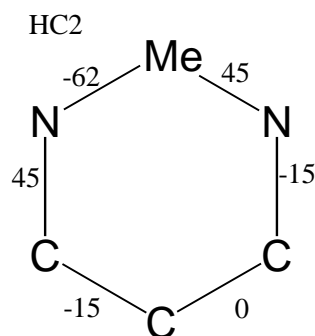
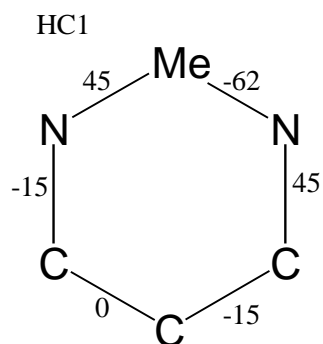


Ahora colocamos el átomo de cobalto en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión. Es obvio que se puede repetir para los otros seis casos.

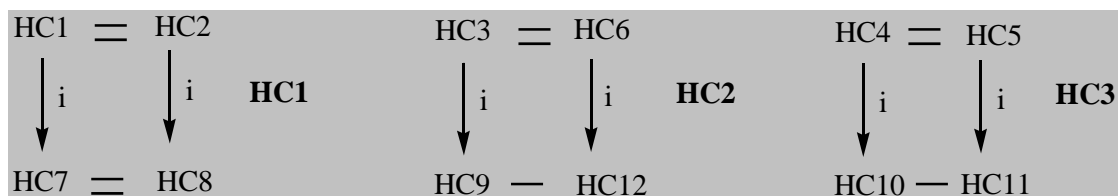




Ahora colocamos, como siempre, los átomos de cobalto en la parte superior del hexágono y, además, reordenamos las conformaciones para comprobar que HC1= HC2, HC3 = HC6 y HC4 = HC5:

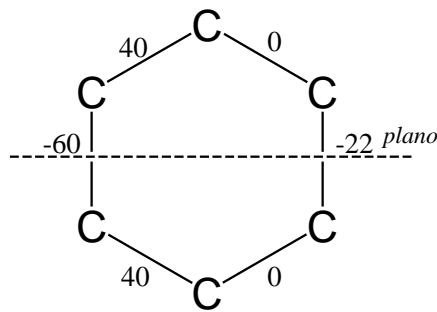


Como hemos señalado, podríamos repetir el proceso para las otras seis conformaciones (HC7 → HC12). El resultado global es

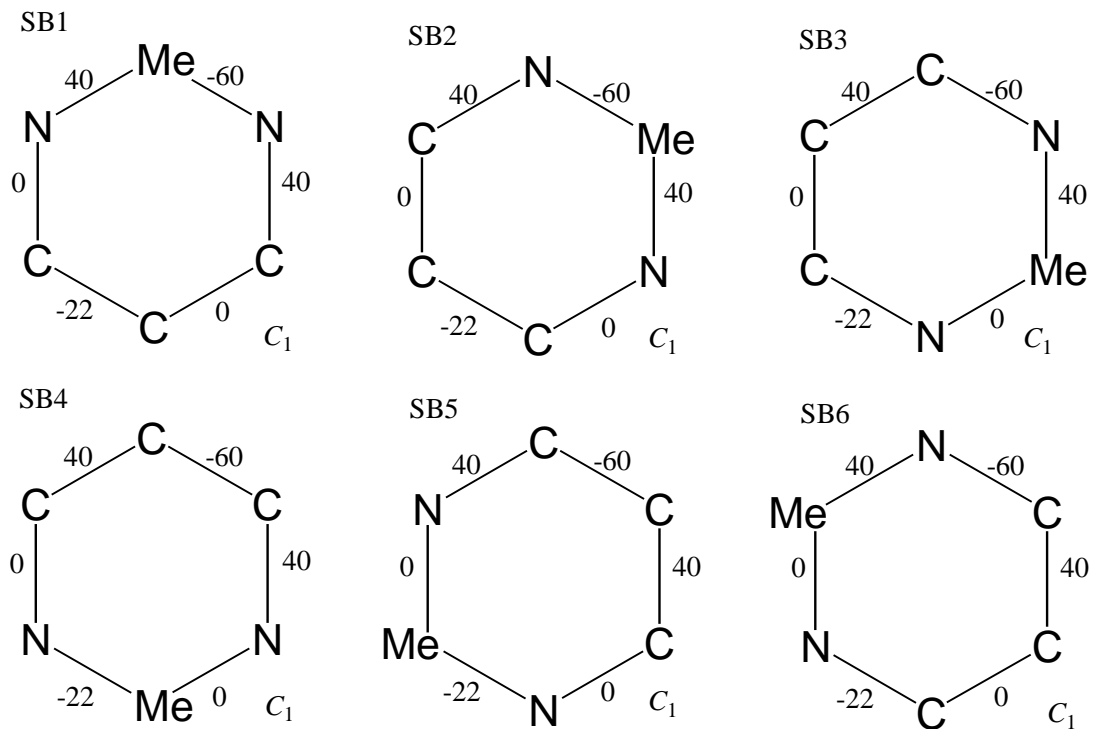


Finalmente, vamos a repetir el razonamiento para las doce conformaciones *screw-boat*,  $C_2$ , con una secuencia de ángulos de torsión para las seis primeras de valores de 40, 0, -22, 0, 40, -60.

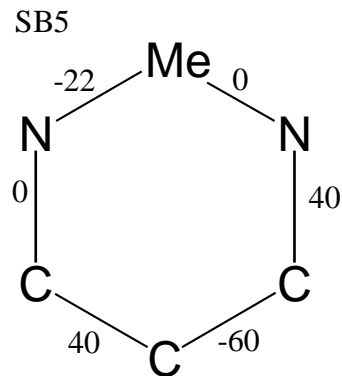
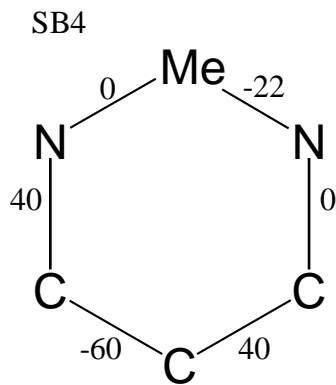
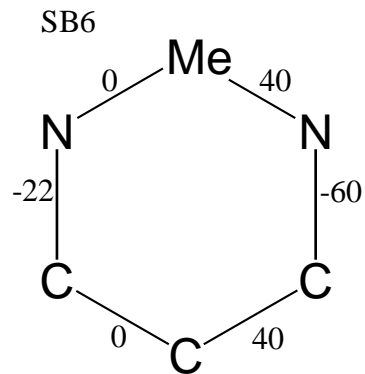
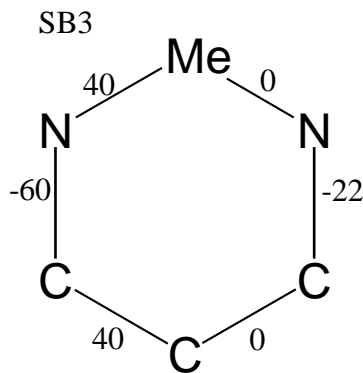
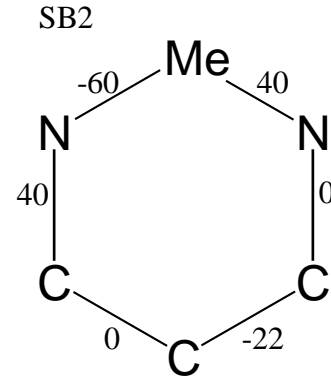
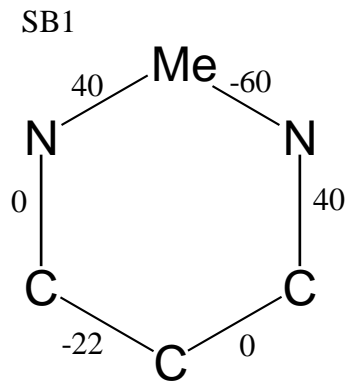
*screw-boat* ( $C_2$ )



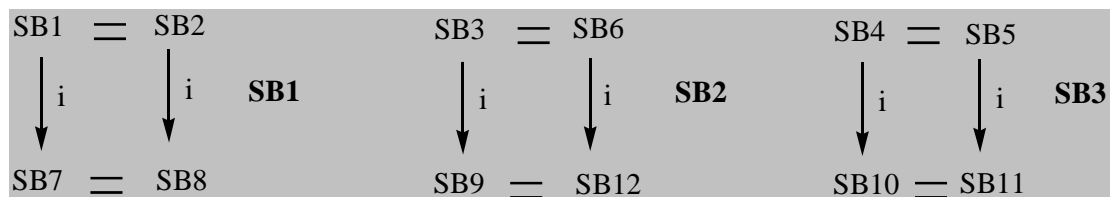
Colocamos el átomo de cobalto en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión, obteniendo



Una vez colocados los átomos de cobalto en la parte superior del hexágono, reordenamos las conformaciones para obtener SB1=SB2, SB3=SB6 y SB4=SB5:



El resultado obtenido es el mismo que para la anterior conformación ya que las secuencias son similares, cambiando solamente los valores: 45, -15, 0, -15, 45, -62 frente a 40, 0, -22, 0, 40, -60. El resultado global es



Por tanto, hemos obtenido las siguientes conformaciones:

**C1** → 60, -60, 60, -60, 60, -60

**B1** → 0, 60, -60, 0, 60, -60

**B2** → 60, -60, 0, 60, -60, 0

**TB1** → 33, 33, -70, 33, 33, -70

**TB2** → -70, 33, 33, -70, 33, 33

**E1** → 30, 0, 0, -30, 60, -60

**E2** → -30, 60, -60, 30, 0, 0

**E3** → 0, 0, -30, 60, -60, 30

**E4** → 0, -30, 60, -60, 30, 0

**HC1** → 45, -15, 0, -15, 45, -62

**HC2** → 0, -15, 45, -62, 45, -15

**HC3** → -15, 45, -62, 45, -15, 0

**SB1** → 40, 0, -22, 0, 40, -60

**SB2** → -22, 0, 40, -60, 40, 0

**SB3** → 0, 40, -60, 40, 0, -22

El número de conformaciones es el mismo, como no podía ser de otra manera, que el obtenido matemáticamente. Los resultados son similares, no iguales, ya que, como hemos visto, hay casos en que podríamos haber dado la secuencia de la imagen especular en vez de la aportada.

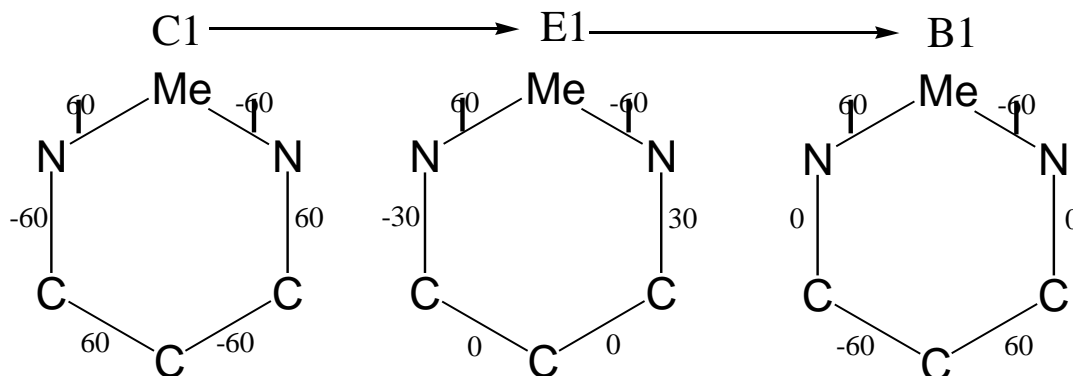
### **Rutas de interconversión en las diaminas de cobalto**

Vamos a repetir para las 50 conformaciones teóricas las diferentes rutas utilizadas anteriormente para las 6 conformaciones del ciclohexano. Una vez concluido cada caso lo reflejaremos en función de las 15 conformaciones obtenidas para nuestras diaminas de cobalto. El estudio lo realizamos de forma metódica para todas las combinaciones posibles. Algunas de ellas se repetirán, como veremos en el transcurso del proceso.

### Transformación



En este caso, las transformaciones posibles son:

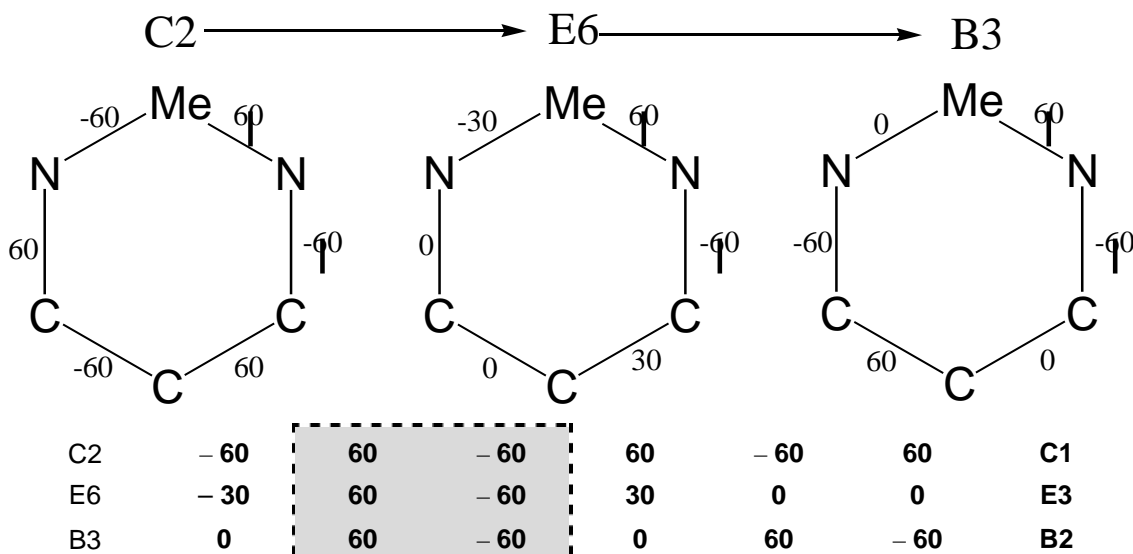


En ella, los ángulos de torsión que se mantienen, 60 y -60, están alrededor del átomo de cobalto (marcados con sombreado en la tabla siguiente) y los demás varían con la misma secuencia que en la transformación estudiada anteriormente.

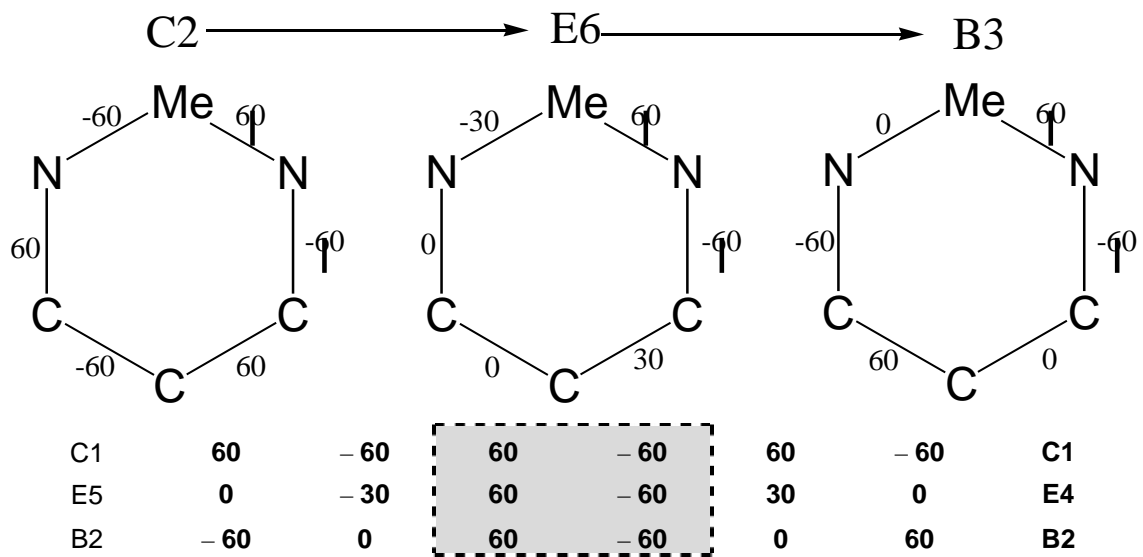
C1	60	-60	60	-60	60	-60	<b>C1</b>
E1	60	-60	30	0	0	-30	<b>E1</b>
B1	60	-60	0	60	-60	0	<b>B1</b>

En la parte derecha de la tabla hemos recogido en negrita la nomenclatura ya descrita para las 15 conformaciones de las diaminas de cobalto: **C1→E1→B1**

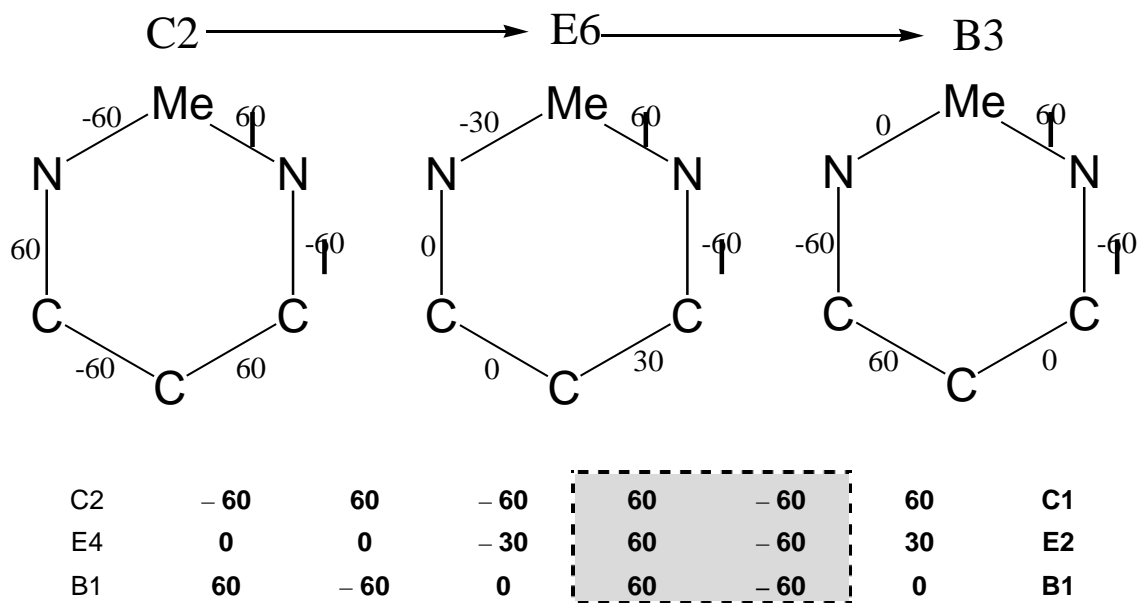
La siguiente transformación es:



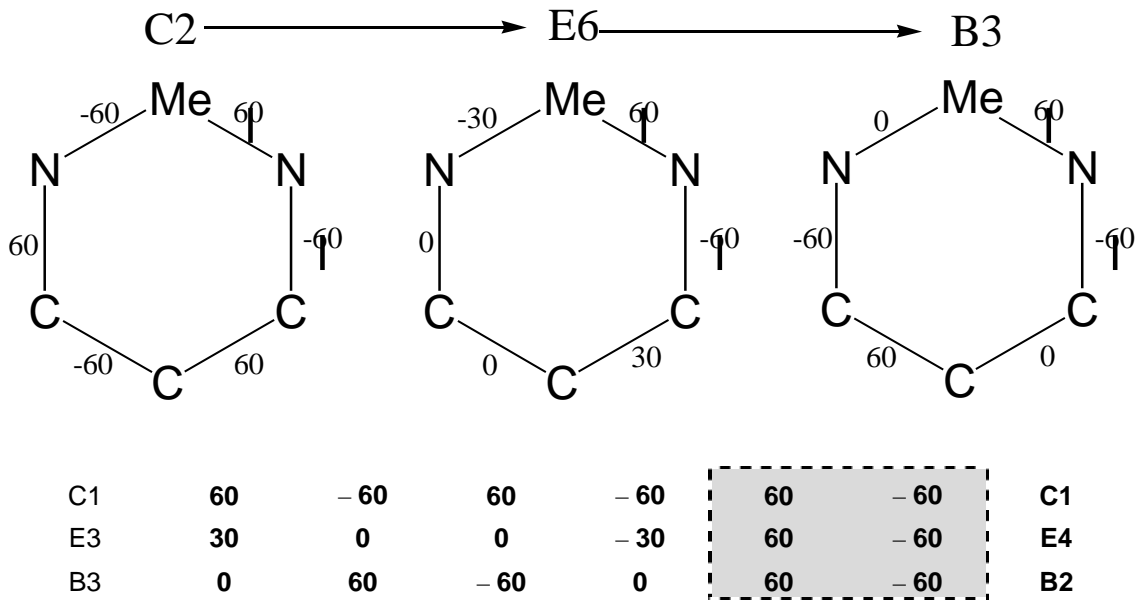
Por tanto la transformación resultante es  $C1 \rightarrow E3 \rightarrow B2$



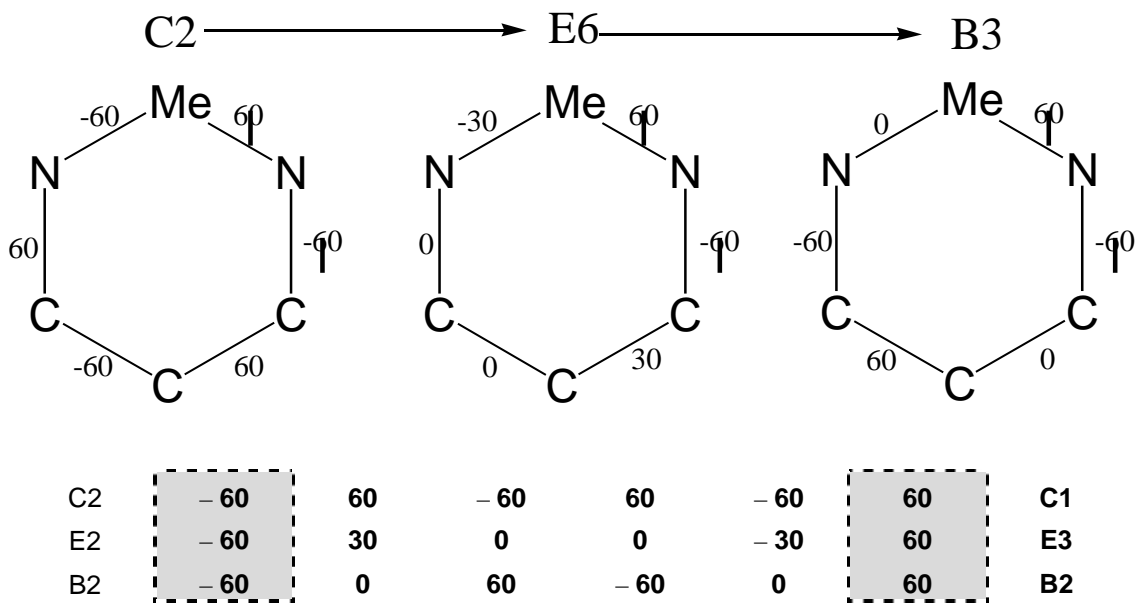
La transformación es  $C1 \rightarrow E4 \rightarrow B2$



La transformación es  $C1 \rightarrow E2 \rightarrow B1$



La transformación es **C1→E4→B2**



La transformación es **C1→E3→B2**

Una vez acabado el proceso vamos a comprobar que hemos recogido todas las rutas posibles. Para ello basta con ver cómo los ángulos de torsión que se mantienen van ocupando los distintos vértices del hexágono. El resultado obtenido, para las 15 conformaciones teóricas es:



**C1→E1→B1**

**C1→E3→B2**

**C1→E4→B2**

**C1→E2→B1**

**C1→E4→B2**

**C1→E3→B2**

Observamos que hay repetidas dos rutas, por lo que el resultado definitivo es

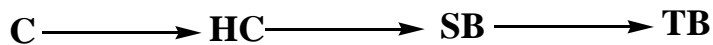
**C1→E1→B1**

**C1→E2→B1**

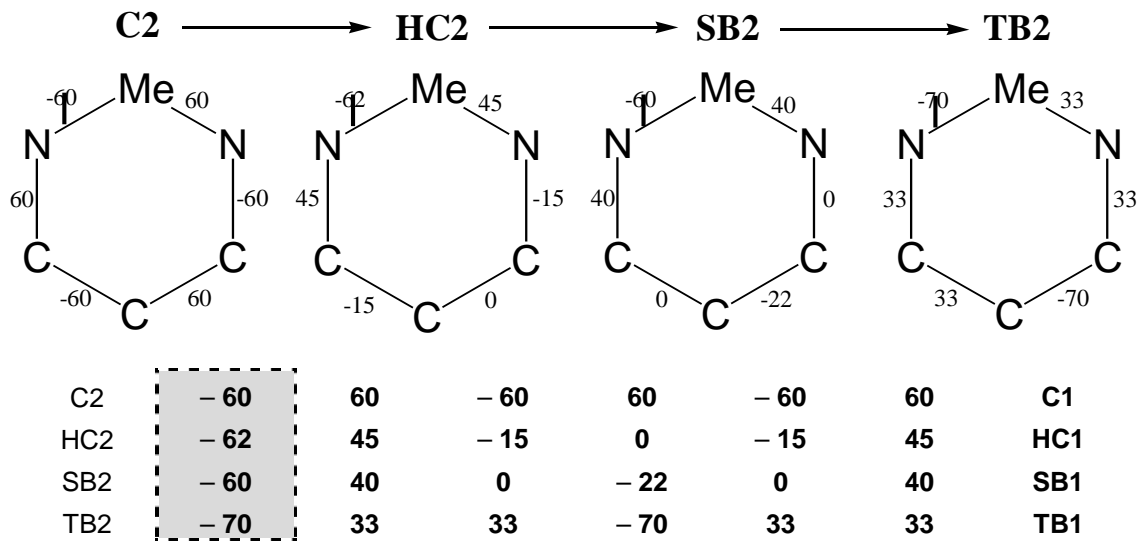
**C1→E3→B2**

**C1→E4→B2**

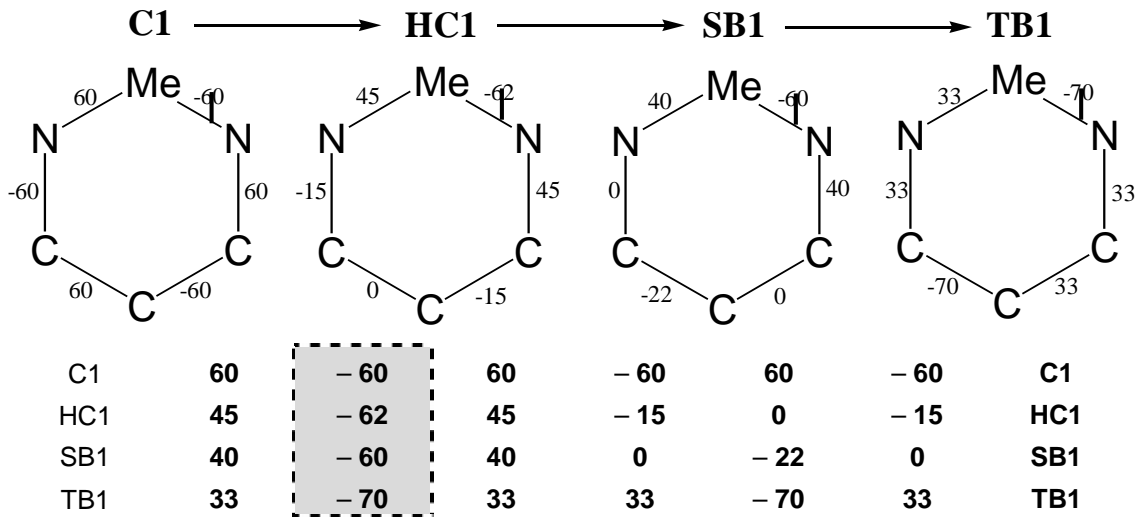
### Transformación



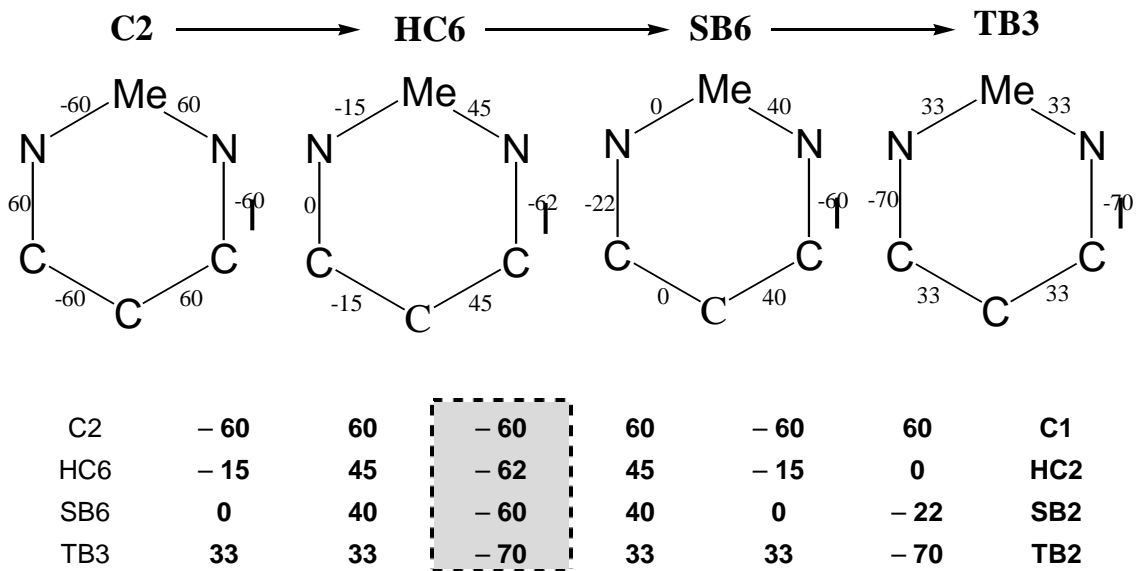
Tomamos ahora la ruta en la que se mantiene el eje, y obtenemos las siguientes transformaciones:



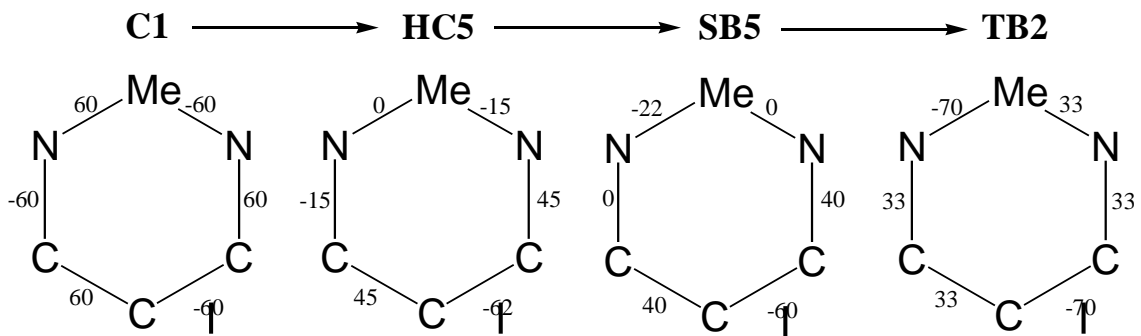
La transformación es **C1→HC1→SB1→TB1**



La transformación es **C1→HC1→SB1→TB1**

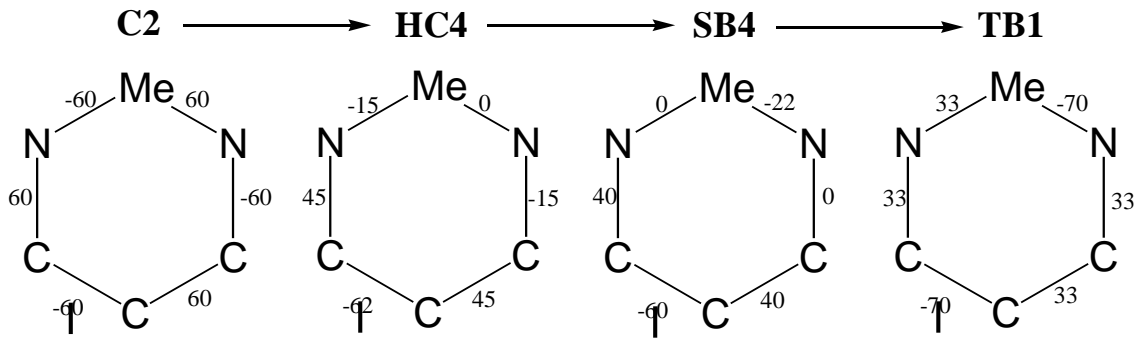


La transformación es **C1→HC2→SB2→TB2**



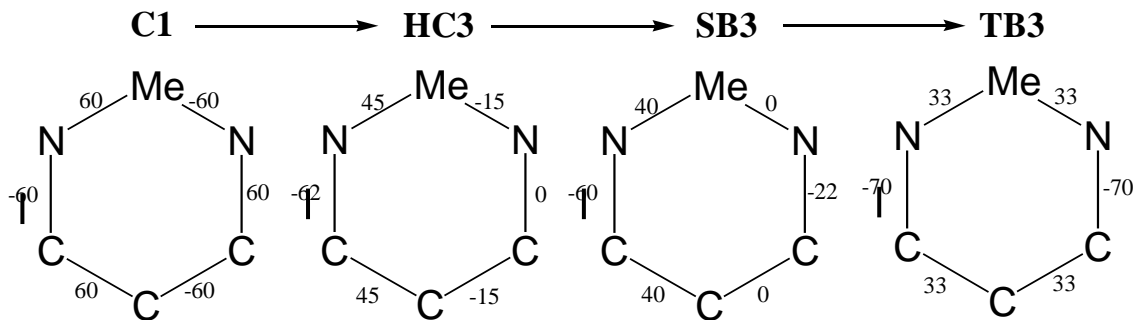
C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
HC5	0	-15	45	-62	45	-15	HC3
SB5	-22	0	40	-60	40	0	SB3
TB2	-70	33	33	-70	33	33	TB1

La transformación es  $C1 \rightarrow HC3 \rightarrow SB3 \rightarrow TB1$



C2	-60	60	-60	60	-60	60	C1
HC4	-15	0	-15	45	-62	45	HC3
SB4	0	-22	0	40	-60	40	SB3
TB1	33	-70	33	33	-70	33	TB1

La transformación es  $C1 \rightarrow HC3 \rightarrow SB3 \rightarrow TB1$



C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
HC3	45	-15	0	-15	45	-62	HC2
SB3	40	0	-22	0	40	-60	SB2
TB3	33	33	-70	33	33	-70	TB2

La transformación es  $C1 \rightarrow HC2 \rightarrow SB2 \rightarrow TB2$

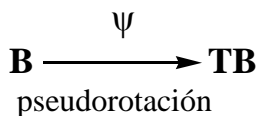
Acabado el proceso podemos comprobar que se recogen todas las rutas posibles, verificando que los ángulos de torsión que se mantienen van ocupando los distintos vértices del hexágono. El resultado obtenido, para las 15 conformaciones teóricas es:

- C1→HC1→SB1→TB1
- C1→HC1→SB1→TB1
- C1→HC2→SB2→TB2
- C1→HC3→SB3→TB1
- C1→HC3→SB3→TB1
- C1→HC2→SB2→TB2

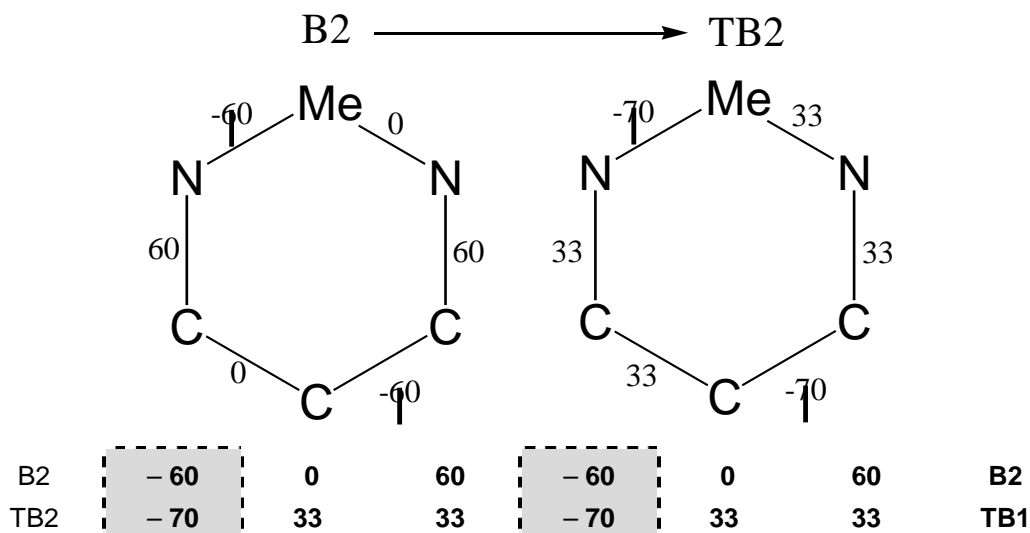
Observamos que hay repetidas tres rutas, por lo que el resultado definitivo es:

- C1→HC1→SB1→TB1
- C1→HC2→SB2→TB2
- C1→HC3→SB3→TB1

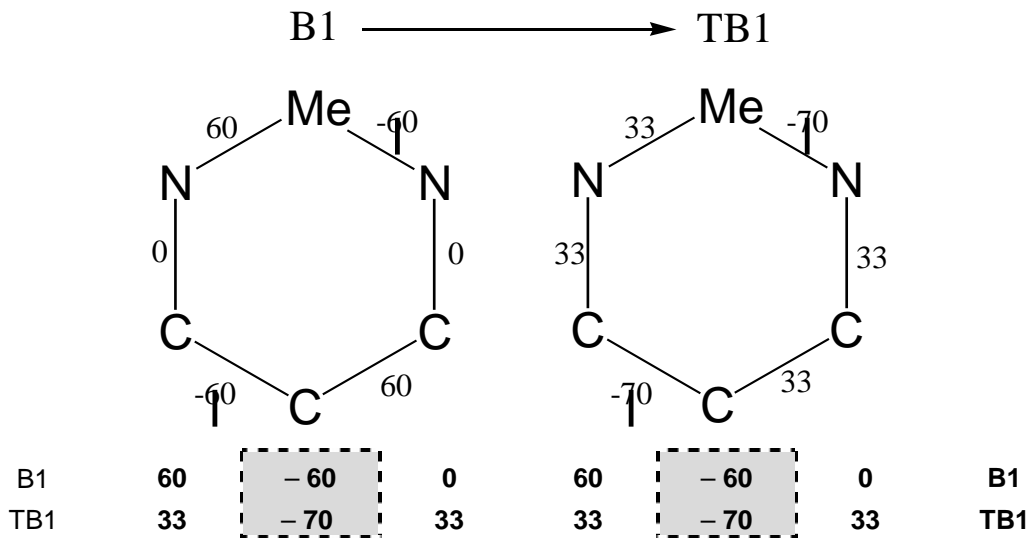
### Transformación



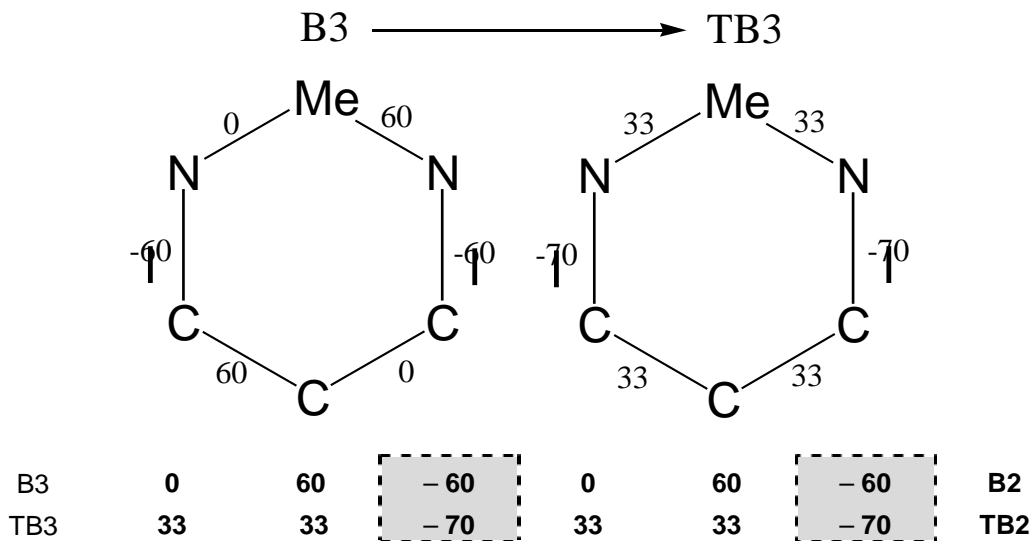
Las transformaciones posibles para este último caso, son las siguientes:



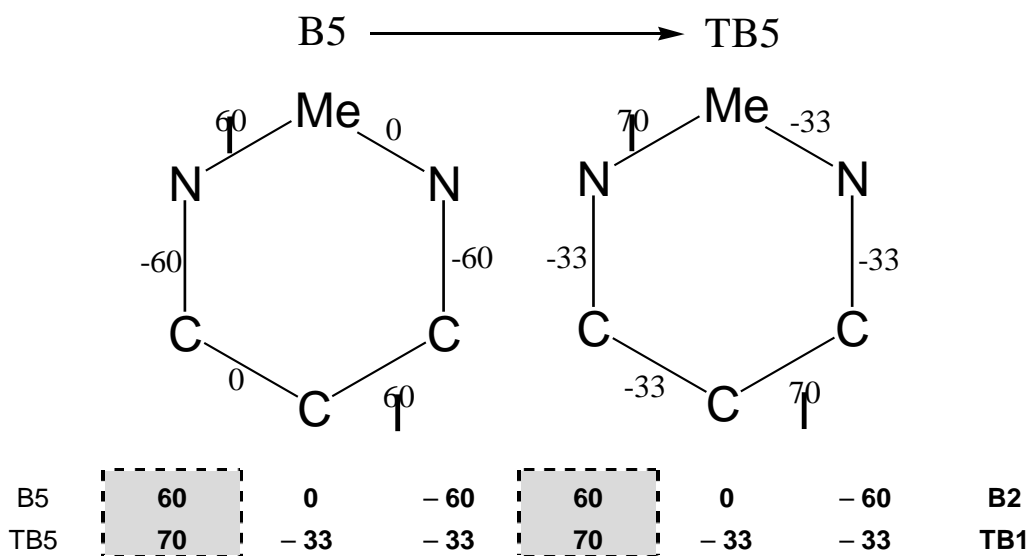
La transformación es **B2→TB1**



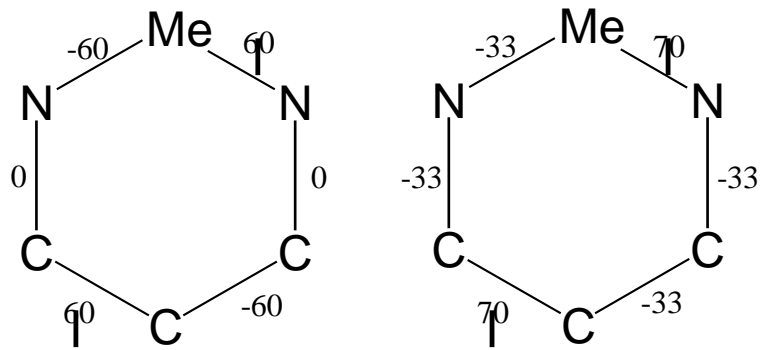
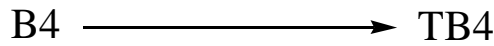
La transformación es **B1**→**TB1**



La transformación es **B2**→**TB2**

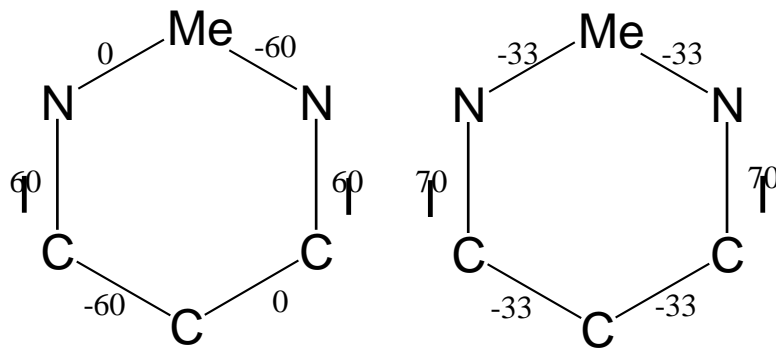
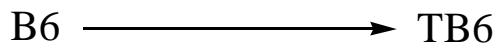


La transformación es **B2→TB1**



B4	-60	60	0	-60	60	0	B1
TB4	-33	70	-33	-33	70	-33	TB1

La transformación es **B1→TB1**



B6	0	-60	60	0	-60	60	B2
TB6	-33	-33	70	-33	-33	70	TB2

La transformación es **B2→TB2**

El resultado obtenido, para las 15 conformaciones teóricas es:

**B1→TB1**

**B2→TB1**

**B2→TB2**

**B2→TB1**

**B1→TB1**

**B2→TB2**

En este caso, el resultado definitivo es:

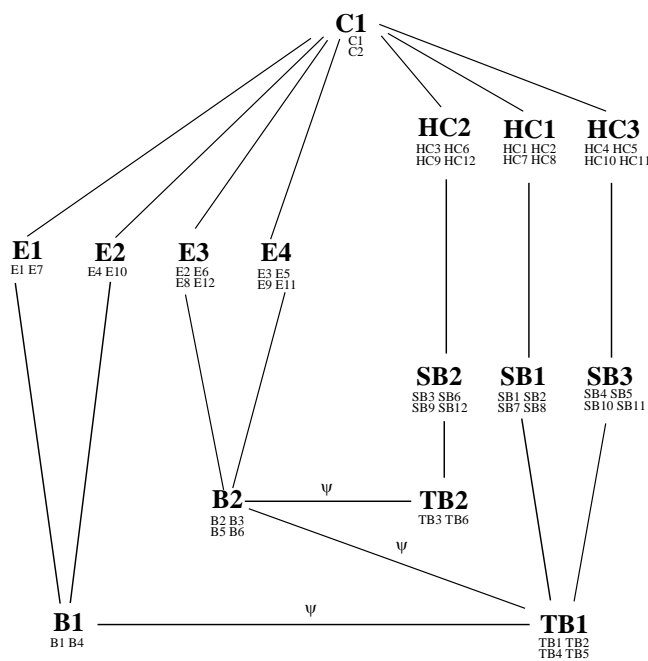
**B1→TB1**

**B2→TB1**

**B2→TB2**

**Esquema de interconversión en las diaminas de cobalto**

El resultado de todo el proceso desarrollado en el epígrafe anterior nos lleva al siguiente esquema (aplicado específicamente a diaminas de cobalto):



#### **I.4.- OBJETIVOS Y ESTRUCTURACIÓN DEL TRABAJO**

Los objetivos a alcanzar en el presente Proyecto son:

1.- Utilizar la base de datos Cambridge Structural Database, CSD, para realizar una **nueva** búsqueda sin restricciones de todos los compuestos que *a priori* presenten anillos de 6 miembros con ligandos quelato simétricos (N-N, P-P, O-O, S-S) en complejos de níquel, paladio y platino.

Entre los compuestos anteriores, utilizando los programas *ConQuest* y *Mercury*:

2.- Discriminar aquellos compuestos que no cumplan los requisitos estructurales requeridos para nuestro estudio.

3.- Aplicar el Método de Clasificación para establecer cuál es la configuración más probable que presenta cada estructura.

4.- **Comparar los resultados obtenidos con los del anterior Proyecto Fin de Carrera realizado por el mismo autor en 2009.**

La estructuración del trabajo a realizar queda reflejada en la lectura de los objetivos a conseguir y se puede resumir así:

- buscar sin restricción las estructuras en la CSD.
- discriminar aquellas que no cumplan los requisitos necesarios.



**Bibliografía I**

- Allen, F. H.; Howard, J. A. K. & Pitchford, N. A.; "Symmetry- Modified Conformational Mapping and Classification of the Medium Rings from Crystallographic Data. IV. Cyclooctane and Related Eight-Membered Rings". *Acta Cryst.* **B52**, 1996, 882.
- Allen, F.H.; Davies, J. E.; Galloy, J.J.; Johnson, O.; Kennard, O.; MacCrae, C.F.; Mitchell, E.M.; Smith, J. M.; Watson, D. G. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **31**, 1991, 187.
- Allen, F.H.; Doyle, M.J.; Auf Der Heyde, T.P.E. *Acta Crystallogr.* **B47**, 1991, 412.
- Allen, F. H.; Kennard, O.; Taylor, R. *Acc. Chem. Res.* **16**, 1983,146.
- Allen, F.H. and Taylor, R. *Acta Cryst.* **B 47**, 1991, 404-412
- Allinger, N. L.; Hirsh, J.A.; Miller, M.A.; Tyminski, I.J.J. *Am. Chem. Soc.* **91**, 1969, 337.
- Columbus, I.; Cohen, S.; Biali, S. E. *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 1994, 10306.
- Conklin, D.; Fortier, S.; Glasgow, J. I. & Allen, F. H.. "Conformational Analysis from Crystallographic Data using Conceptual Clustering". *Acta Cryst.* **B52**, 1996, 535.
- DaCruz, M. F. and Zimmer, M. *Inorg. Chem.* **35**, 1996, 2872-2877.
- Dasgupta, S.; Tang, Y.; Moldowan, J. M.; Carlson, R. M. K.; Goddard, W. A., III. *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 1995, 6532.
- Gautheret, D.; Major, F.; Cedergren, R. *J. Mol. Biol.* **229**, 1993, 1049.
- Geue, R. J.; Snow, M. R. *J. Chem. Soc. A* 1971, 2981.
- Giralt, E. "Introducción a la estereoquímica de los compuestos orgánicos". Ed. Reverté, 1984.
- Gollogly, J. R.; Hawkins, J. *Inorg. Chem.* **11**, 1972, 156.
- Gordon, H. I.; Somorai, R.L. *Proteins: Struct.; Funct., Genet.* **14**, 1992, 249.
- Hambley, T. W.; Hawkins, C. J.; Palmer, J. A.; Snow, M. R. *Aust. J. Chem.* **34**, 1981, 45.
- Hambley, T. W.; Searle, G. H.; Snow, M. R. *Aust. J. Chem.* **35**, 1982, 1285.
- Hendrickson, J. B. *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 1967, 7036-7043.
- Holm, L.; Sander, C. *J. Mol. Biol.* **233**, 1993, 123.
- Karpen, M. E.; Tobias, D.J.; Brooks, C. L.. III. *Biochemistry* **32**, 1993, 412.
- Niketic, S. R.; Woldbye, F. *Acta Chem. Scand.* **27**, 1973, 621.
- Niketic, S. R.; Woldbye, F. *Acta Chem. Scand.* **27**, 1973, 3811.
- Niketic, S. R.; Rasmussen, K.; Woldbye, F.; Lifson, S. *Acta Chem. Scand.* **A30**, 1976, 485.
- Sachse, H. *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **23**, 1890, 1363.
- Sharpe, A. G.; "Química Inorgánica". Ed. Reverté, 1993.
- Sieburth, S. M. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1994. 1663.
- Strauss, H. L. *J. Chem. Educ.* **48**, 1971, 221.
- Taylor, R.; Allen, F. H.; Burgi, H.-B., Dunitz, J. D., Eds.; VCH: Weinheim. *Structure and Correlation*, **23**, 1994, 624.
- Torda, A. E.; Van Gunsteren, W. F. *J. Comput. Chem.* **12**, 1994, 1331.

## II.- METODOLOGÍA

### II.1.- MEDIOS A UTILIZAR

#### II.1.1.- Base de datos CSD

Cambridge Structural Database, CSD, es una base de datos que contiene información cristalográfica de compuestos orgánicos y organometálicos. La mantiene y distribuye Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC, en el Reino Unido.

Para hacernos una idea de la enorme cantidad de datos que contiene basta con señalar que la versión 5.26 de noviembre de 2004 tiene 272066 compuestos. La siguiente actualización, de febrero de 2005, añade 9.870 compuestos más.

Nuestra búsqueda la llevaremos a cabo con la versión 5.29 (5.32), de noviembre de 2008 (noviembre de 2011), que contiene 423752 (525095) compuestos.

La información se organiza en tres categorías:

- Información unidimensional: textos y artículos
- Información bidimensional: diagramas químicos estructurales, propiedades atómicas y propiedades de enlace
- Información tridimensional: descripción de la estructura cristalina.

Los principales programas que permiten analizar esa información son:

- *CONQUEST 1.11 (1.13)* se pueden realizar búsquedas empleando como condiciones datos de composición química, bibliográficos, estructurales, etc.
- *VISTA*: analiza los resultados de las búsquedas efectuadas y los presenta en forma de tabla
- *MERCURY 2.2 (3.3)*: visualiza las estructuras en 3D.

La CSD tiene unos registros o entradas mediante los que relaciona, en cada uno de ellos, una publicación individual con una estructura cristalina específica de la base de datos.

A cada entrada se le asigna un código o clave propio, *refcode*, compuesto de dos partes:

- la primera, de seis letras, que identifica a los componentes químicos, y
- la segunda, formada por dos dígitos adicionales, en la que el primero hace referencia a la publicación inicial (0) o a publicaciones posteriores del mismo estudio (1, 2,...), mientras que el segundo dígito alude a experimentos posteriores sobre el mismo com-

puesto pero preparado a diferente temperatura o con otros disolventes, estudiado con radiaciones diferentes, etc.

### II.1.1.1.- Programa *ConQuest*

Seguidamente vamos a describir brevemente el empleo del programa *ConQuest 1.11 (1.13)* para formular un algoritmo de búsqueda que nos permita hallar los compuestos objeto de nuestro estudio: anillos saturados de 6 átomos con ligandos quelato asimétricos en complejos de níquel, paladio y platino. Para ello realizaremos una búsqueda para cada uno de los metales y para cada pareja de ligandos (N-P, N-O, N-S, P-O, P-S, O-S) utilizando el esquema de la Figura 24 (personalizado para níquel y N-P):

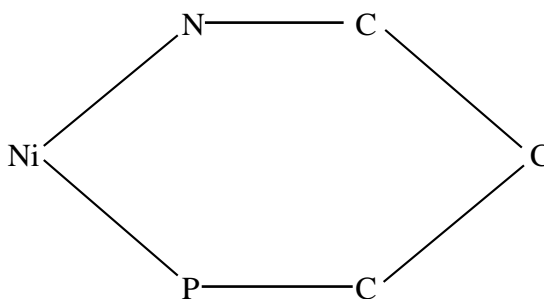


Figura 1

Como el primer objetivo del trabajo es la búsqueda de todas las posibles conformaciones que cumplan la condición del esquema anterior, no habrá restricción alguna.

Para no extendernos demasiado en el uso del programa anterior, resumimos los diferentes pasos que hay que dar para construir el esquema que permitirá realizar la búsqueda que deseamos:

- 1º Selección del metal, níquel, paladio o platino en nuestro caso.
- 2º Introducción de los restantes elementos: C y N, etc.
- 3º Unión entre ellos hasta formar el esquema. En la pantalla del ordenador (Figura 2) aparecerá así:

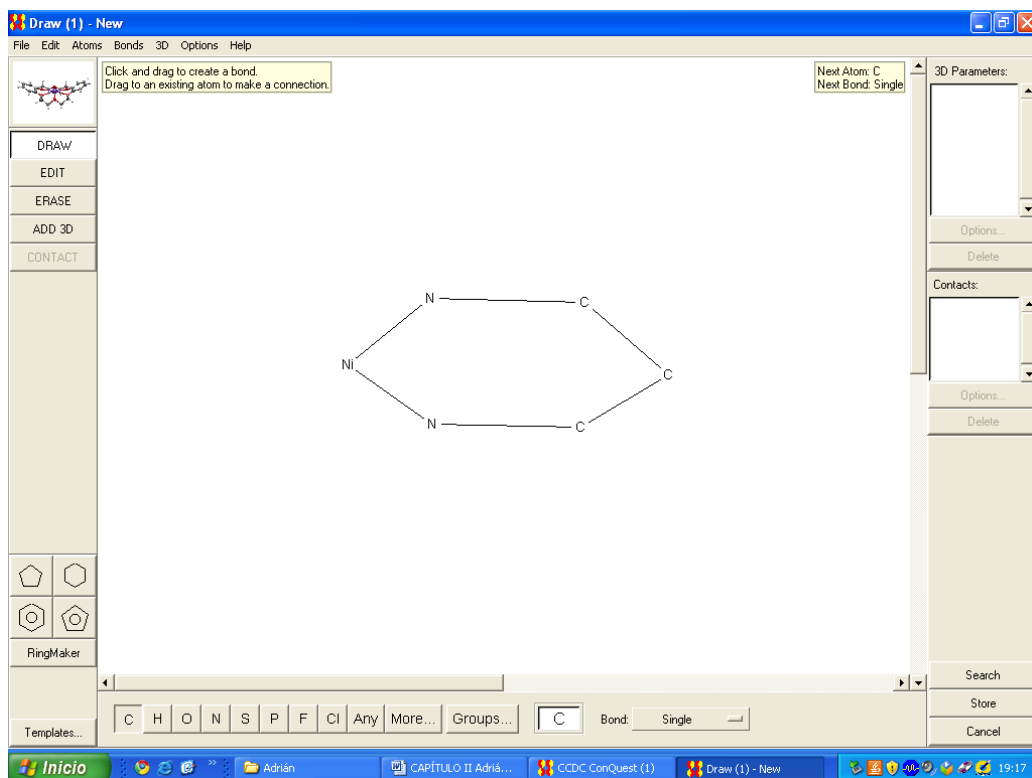


Figura 2

4º) Almacenamiento de la estructura definida como condición de búsqueda por defecto.

5º) Búsqueda mediante la opción *search*. Aparecerá en pantalla un cuadro como el de la Figura 3.

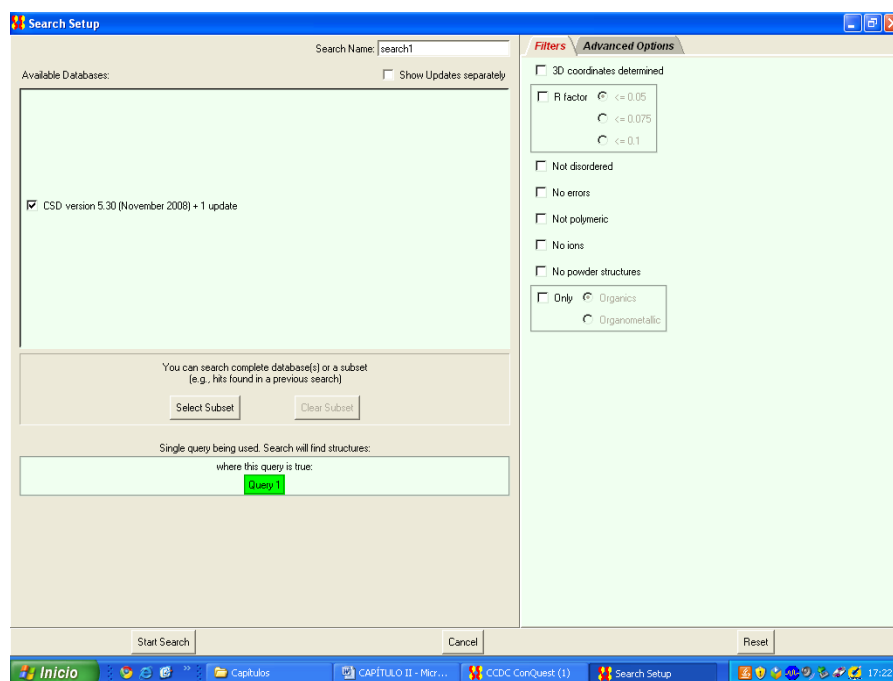


Figura 3

Aquí tenemos la posibilidad de imponer restricciones de búsqueda basadas en las condiciones de calidad con que se ha determinado la estructura pudiendo restringirla a compuestos con la estructura 3D determinada o no, a valores del factor *R* cualesquiera o inferiores a 0.1, 0.075 ó 0.05, eliminar o no las estructuras iónicas, etc.

Como ya señalamos anteriormente, no vamos a imponer restricciones.

6º) Obtención de resultados. Se ofrecen de la forma que se observa en la Figura 4:

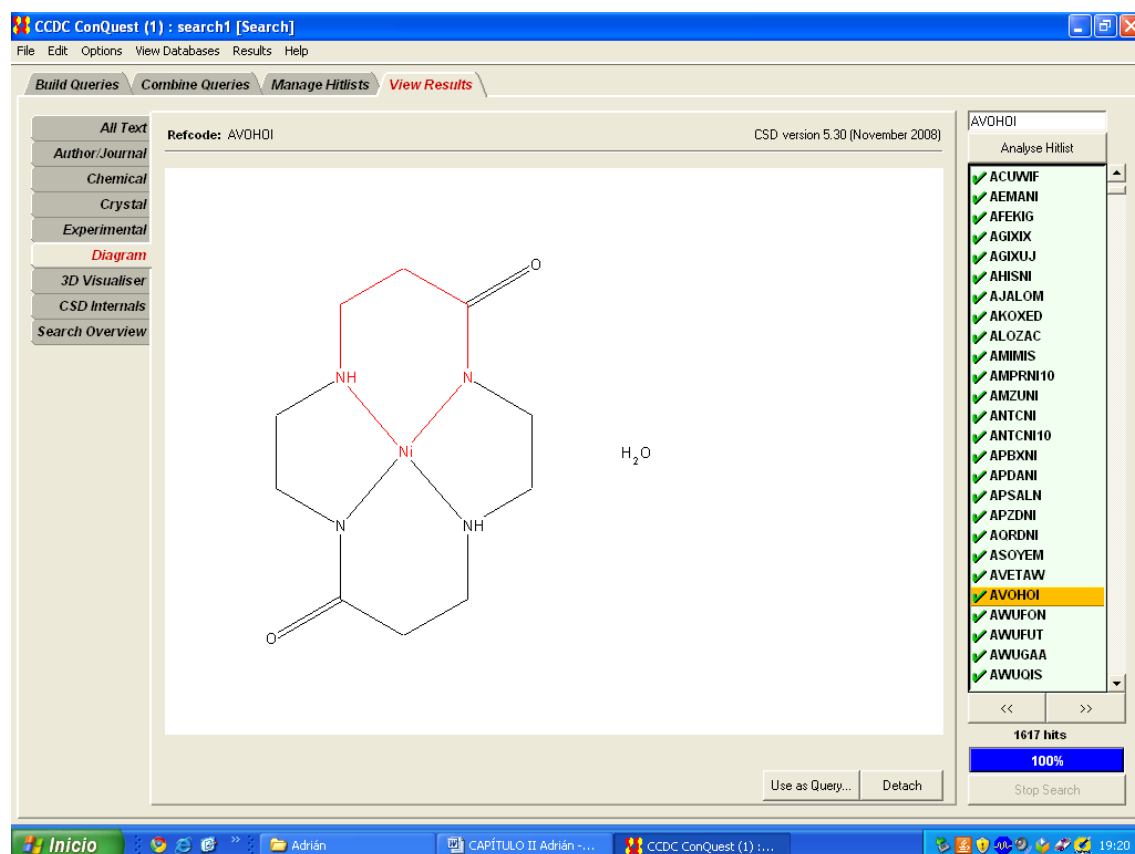


Figura 4

En el lado derecho de la pantalla aparecen los datos (*refcode*) como una vista secuencial ordenada alfabéticamente, recogándose a su pie el número total de estructuras seleccionadas.

En la parte central, según cuál sea la pestaña del lado izquierdo que tenemos activada, podemos observar la información correspondiente al compuesto seleccionado en la lista; así podemos acceder a información bibliográfica, química, cristalográfica o experimental, al diagrama bidimensional (como el de la

figura), a la estructura tridimensional, a los datos de identificación y clasificación de la CSD o a las condiciones de búsqueda impuestas para seleccionarla.

7º) Finalmente, se archivan los datos mediante un fichero con extensión .cqs.

La utilidad de tener guardada la búsqueda es múltiple ya que además de poder recuperarla en cualquier momento, podemos trabajar con ella sin tener que recurrir a toda la base de datos lo que hará que procesos tales como clasificar por metales los compuestos obtenidos sean más rápidos y sencillos.

### II.1.1.2.- Programa *Mercury*

Este programa de ordenador es una de las herramientas más utilizadas en el presente Proyecto ya que permite visualizar estructuras cristalinas en tres dimensiones.

A continuación se muestra la pantalla principal del programa en la Figura 5:

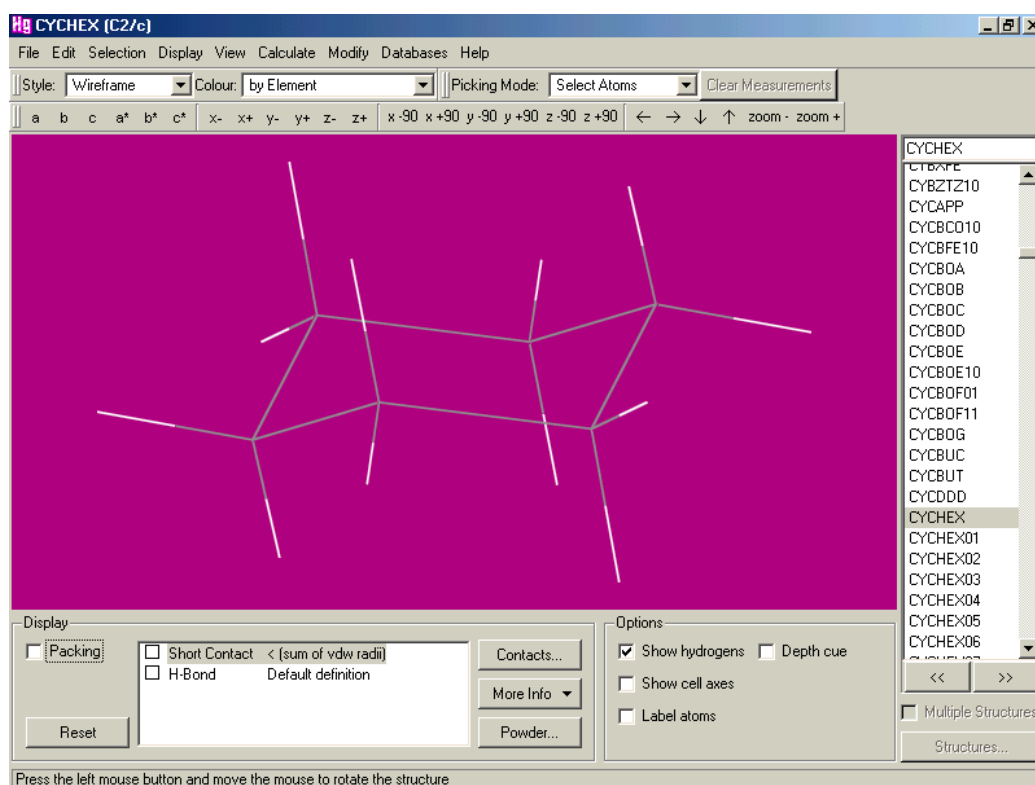


Figura 5

Entre las “operaciones” que ofrece destacan las siguientes (Figuras de la 6 a la 9):

- Visualizar estructuras cristalinas cuyos datos están guardados en diferentes formatos (*cif*, *pdb*, *mol*, etc.).
- Rotar y trasladar en la pantalla del ordenador estructuras cristalinas en 3D y visualizar sus ejes de celda y planos de Miller.

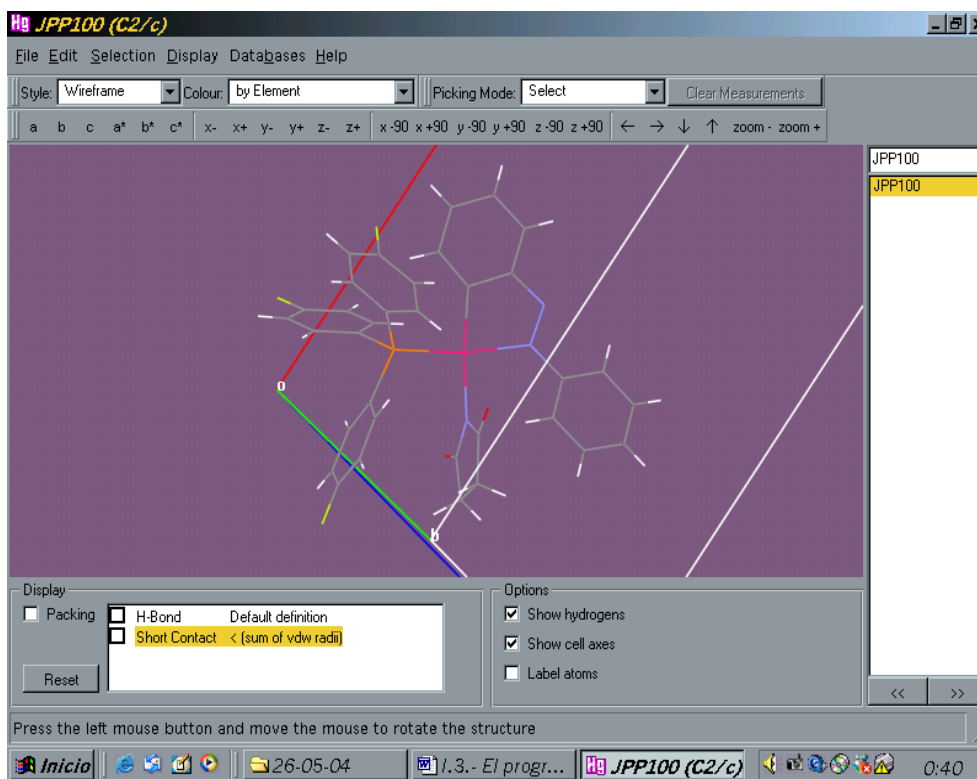


Figura 6

- Modificar la presentación de las estructuras variando el color y estilo de sus átomos y enlaces así como el color de fondo de la pantalla. Asimismo, tiene la capacidad de ocultar los átomos que se desee, de volver a visualizarlos y de etiquetarlos.

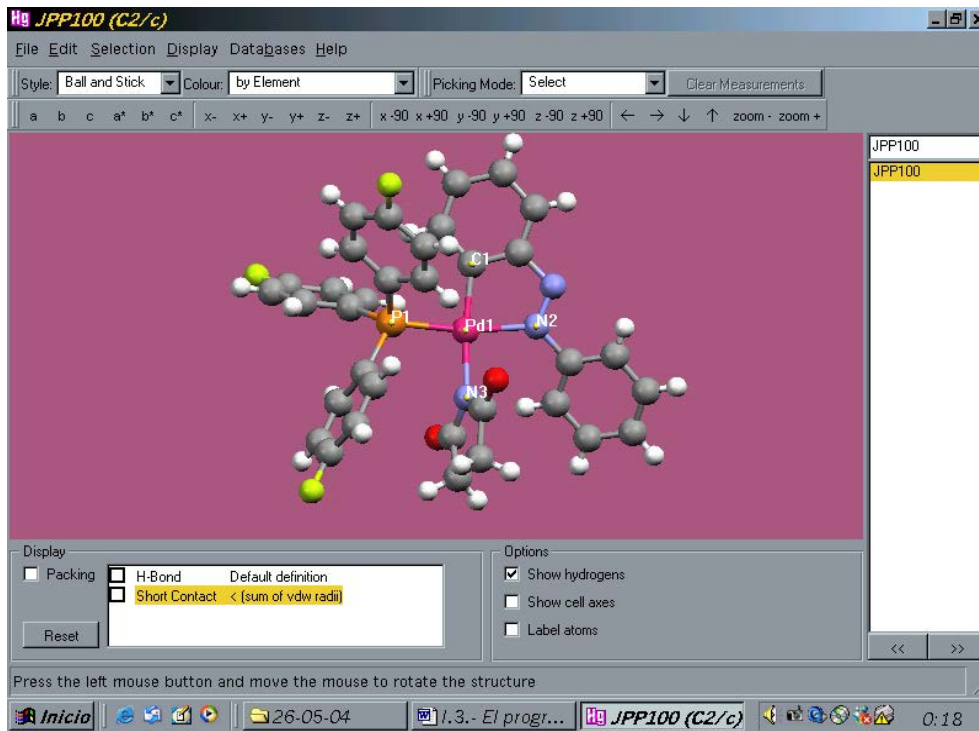


Figura 7

- Medir distancias, ángulos y ángulos de torsión los átomos seleccionados.

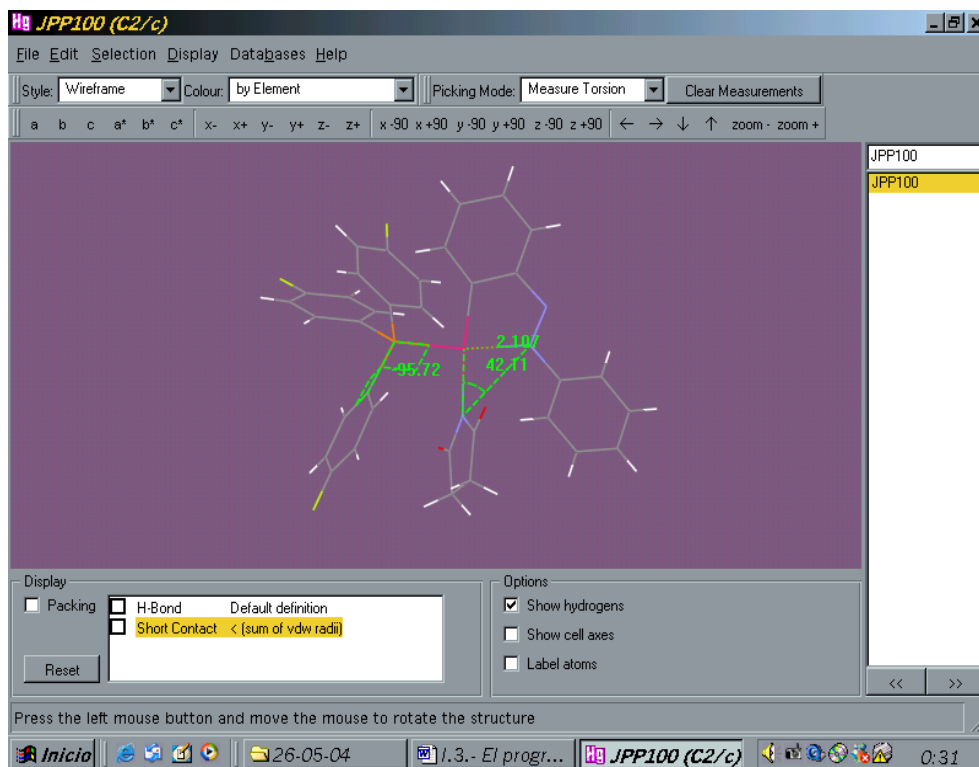


Figura 8



- Guardar las modificaciones realizadas, pudiendo utilizar las imágenes obtenidas en otras aplicaciones.
- Localizar y visualizar, si los hay, enlaces de hidrógeno intra e intermoleculares.
- Variar discrecionalmente el tamaño de la estructura respecto al de la pantalla con la finalidad de hacer crecer y visualizar la red cristalina en la dirección deseada.

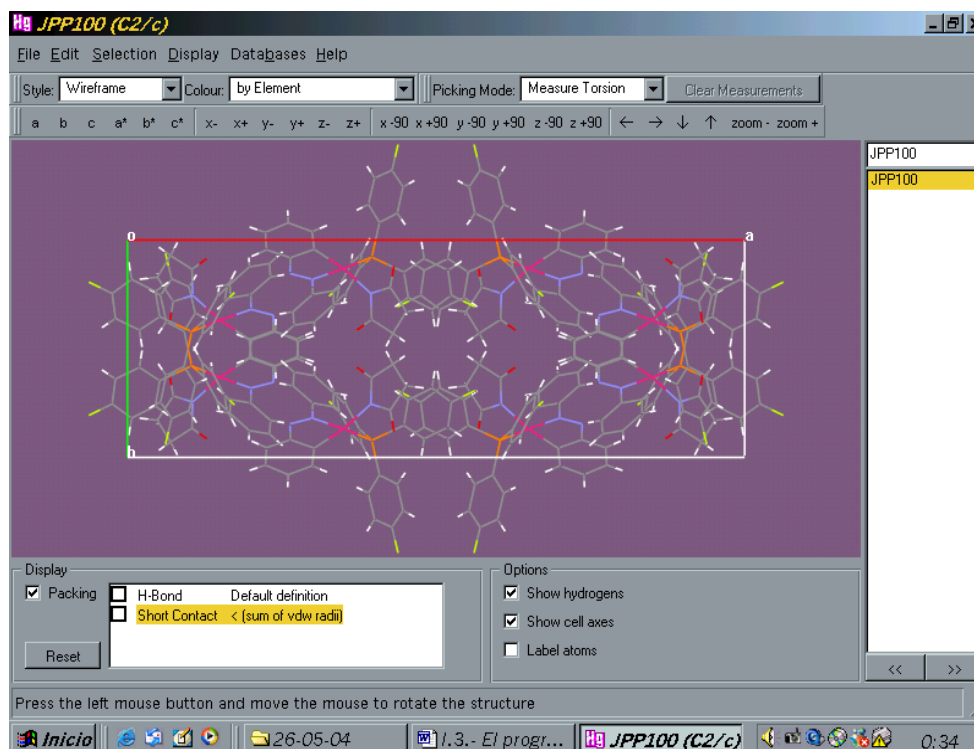


Figura 9

- Trazar planos entre los átomos señalados. Estos planos se pueden visualizar mejor coloreándolos mediante la extensa gama que ofrece la paleta de colores.

El programa no permite medir fácilmente distancias y ángulos entre planos lo que supone un inconveniente a la hora de estudiar el empaquetamiento. En 2002, Bruno *et al.* publicaron un trabajo sobre “nuevo *software* para búsquedas en la Cambridge Structural Database y visualización de estructuras cristalinas” en el que se pone de manifiesto el futuro inmediato de los programas *ConQuest* y *Mercury*. Desgraciadamente, no se prevé que sea posible realizar las citadas medidas aunque las sucesivas mejoras van paliando la situación.

## II.1.2.- Programas específicos

### II.1.2.1.- Métodos Bayesianos para la clasificación conformacional de anillos de seis miembros.

El Área de Química Inorgánica de la UPCT presentó en 2005 dos métodos para la clasificación de anillos de seis miembros basados en un análisis bayesiano [Pérez *et al.*]. Ambos utilizan el mismo modelo probabilístico para la medida de los ángulos de torsión, pero mientras que el primer método usa las formas canónicas del ciclohexano, y dada una secuencia empírica de seis ángulos de torsión, calcula la probabilidad que corresponde a la estructura escogida para cada una de las seis conformaciones canónicas, el segundo método no asume un conocimiento previo de las conformaciones existentes y calcula una clasificación de *clusters* a partir de un conjunto de datos permitiendo detectar nuevas conformaciones.

#### Introducción

El análisis conformacional de complejos orgánicos [Allen, 2002] y metálicos [Zimmer, 2001] es un campo de búsqueda muy activo, siendo la CSD una poderosa herramienta en esta clase de estudios [Allen, 2004 y Orpen, 1993]. A pesar de la gran cantidad de datos estructurales disponibles existe un completo desconocimiento de los factores que determinan la estructura molecular de un compuesto particular. En química organometálica y de la coordinación el modo por el que un ligando controla las propiedades del complejo depende de una combinación de factores estéricos, electrónicos y conformacionales. El conocimiento detallado de estos efectos permitirá un diseño de complejos con propiedades específicas y predecibles [Meyer, 1989].

En 2001, Zimmer revisó los diferentes métodos estadísticos para el análisis conformacional, siendo el análisis de *clusters* y el de componentes principales ejemplos de tales métodos. En contraste a todos ellos, en los métodos desarrollados por el Departamento de Matemática Aplicada y Estadística de la UPCT, un paso esencial es la utilización de un modelo probabilístico para las secuencias de ángulos de torsión observadas. Se basa fundamentalmente en asumir que dichas secuencias de ángulos de torsión se generan a partir de un número  $k$  de conformaciones “preferidas”. Se pueden elegir dos niveles de generalidad: uno en el que se asume que, *a priori*, las conformaciones “preferidas” las aporta el usuario (por ejemplo, las seis conformaciones canónicas del ciclo-

hexano, como las descritas por Hendrickson, ya citadas), u otro en el que no hay datos previos acerca de las conformaciones “preferidas”. Asociados a estos dos niveles de generalidad, se propusieron los dos métodos siguientes:

Primer nivel de generalidad: las conformaciones “preferidas” las aporta el usuario: se realiza una clasificación individual de las estructuras observadas. Basándose en los seis valores de los ángulos de torsión de una estructura, es posible, por medio de la regla de Bayes, computar la probabilidad que tiene la estructura de cada una de las conformaciones “preferidas”. Estas probabilidades dan más información que una sola clasificación: su relativo orden de magnitud indica, en particular, la fuerza de la evidencia en los datos a favor de una conformación dada. Asimismo, se pueden detectar similitudes entre conformaciones. A este método se le denominó “Método de Clasificación”.

Segundo nivel de generalidad: se asume que no hay conocimiento previo de las conformaciones “preferidas”: se determinan la inferencia Bayesiana acerca del número de conformaciones, las conformaciones mismas, su frecuencia de existencia así como las desviaciones estándar asociadas a cada conformación. Como resultado se puede obtener una posterior distribución de cada uno de los parámetros de interés. También se pueden clasificar las estructuras en cada una de las conformaciones obtenidas. A este método se le denominó “Método de Análisis *Full Bayesian*”.

Como resumen, remarcar que el Método de Clasificación desarrolla la clasificación individual de estructuras pero requiere *a priori* la especificación de las conformaciones “preferidas”. El “Análisis *Full Bayesian*” se aplica a un conjunto de estructuras pero permite la detección de nuevas conformaciones y no depende de las conformaciones canónicas teóricas.

### El modelo

Los seis ángulos de torsión observados para una estructura dada obtenidos de la CSD se denotan por  $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)$ . El modelo asumido para el mecanismo de generación de datos resulta de una realización de  $\tau$  que se construye en tres pasos:

(1) Elección al azar de una de las  $k$  conformaciones “preferidas”, según las probabilidades  $p_1, p_2, \dots, p_k$ . Estas probabilidades son parámetros desconocidos que corresponden a la frecuencia natural de ocurrencia de cada conformación “preferida”. Se denota por  $C$  el índice de la conformación elegida (así,  $C$  varía de 1 a  $k$ ).

(2) Hacer que  $\mu(C) = (\mu_{C,1}, \mu_{C,2}, \mu_{C,3}, \mu_{C,4}, \mu_{C,5}, \mu_{C,6})$  sea la secuencia de los ángulos de torsión asociados a la conformación  $C$ . Los valores observados de los ángulos de torsión en  $\tau$  deben corresponder a un punto de partida diferente en la estructura con la secuencia canónica  $\mu(C)$ . Para tener en cuenta este hecho, se eligió al azar un punto de partida  $v$  entre 1 y 6, con probabilidades iguales, y se construyó la secuencia

$$\mu(C,v) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v)\bmod 6+1}, \mu_{C,(v+1)\bmod 6+1}, \dots, \mu_{C,(v+4)\bmod 6+1})$$

donde para cualquier entero  $j$ ,  $j \bmod 6$  denota:  $j$  módulo 6, p.e, el resto de la división entera de  $j$  por 6. Además, la secuencia de los ángulos de torsión se puede leer en el sentido de las agujas del reloj o en el sentido contrario. La versión de  $\mu(C,v)$  en el sentido de las agujas del reloj se obtiene como

$$\mu(C,v) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v+4)\bmod 6+1}, \mu_{C,(v+3)\bmod 6+1}, \dots, \mu_{C,(v)\bmod 6+1}).$$

Ahora se introduce la variable  $d$  la cual toma los valores 1 ó  $-1$  de acuerdo a si la dirección de la rotación es a favor o en contra de las agujas del reloj. Las dos expresiones anteriores se pueden resumir como

$$\mu(C,v,d) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v-1+d)\bmod 6+1}, \mu_{C,(v-1+d\times 2)\bmod 6+1}, \dots, \mu_{C,(v-1+d\times 5)\bmod 6+1}).$$

También es necesario considerar las coordenadas de inversión de las secuencias de los ángulos de torsión obtenidas por un cambio de signo. Por tanto, se introduce al azar la variable  $\delta$  que toma el valor 1 o  $-1$  con igual probabilidad y

$$\mu(C,v,d,\delta) = \delta \times (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v-1+d)\bmod 6+1}, \mu_{C,(v-1+d\times 2)\bmod 6+1}, \dots, \mu_{C,(v-1+d\times 5)\bmod 6+1}).$$

Como ejemplo, consideramos la conformación  $C$  con ángulos de torsión  $60.0, -60.0, 60.0, -60.0, 60.0, -60.0$ . Con índice  $C = 1$  tenemos

$$\mu(1,2,-1,1) = (60.0, -60.0, 60.0, -60.0, 60.0, -60.0).$$

(3) Finalmente, se considera que la secuencia observada se obtiene de  $\mu(C,v,d,\delta)$  después de una perturbación añadida  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6)$  como

$$\tau = \mu(C,v,d,\delta) + \varepsilon,$$

donde los componentes de la perturbación  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$  se asume que son variables al azar independientes gaussianas con un valor medio cero y que el parámetro de varianza  $\sigma_c^2$  puede depender de la conformación C.

Como conclusión, de la relación entre  $\tau, \mu(C, \nu, \delta)$  y  $\varepsilon$ , en el paso 3 deducimos que la densidad  $(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6) \rightarrow f(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)$  de la variable al azar  $\tau$  es fácilmente computable: es una mezcla de leyes multivariantes

$$f(\tau) = \sum_{c=1, \dots, k} p_c f(\tau, c),$$

donde  $f(\tau, c)$  son las mismas mezclas de las leyes multivariantes gaussianas

$$f(\tau, c) = \sum_{\nu=1, \dots, 6} \sum_{d=-1, 1} \sum_{\delta=-1, 1} f_G(\tau, \mu(c, \nu, d, \delta), \sigma_c^2),$$

$\tau \rightarrow f_G(\tau, \mu(c, \nu, d, \delta), \sigma_c^2)$  denotan la densidad de la ley gaussiana de seis dimensiones con valor  $\mu(c, \nu, d, \delta)$  y matriz covarianza diagonal  $\sigma_c^2 \text{Id}$ .

Cuando se analizan los datos de ángulos de torsión hay que tener en cuenta la simetría de la conformación espacial. En particular, para hacer posible el análisis de componentes principales, por ejemplo, a los datos de los ángulos de torsión, éstos se deben expandir por simetría. En estos nuevos métodos se evita la expansión de los datos incorporando las simetrías en el modelo formulado a través del punto de partida, dirección de la rotación y signo de los ángulos de torsión, como se ha descrito anteriormente.

### El Método de Clasificación

Como ya hemos citado, el Método de Clasificación asume el primer nivel de generalidad para el modelo: las conformaciones “preferidas” son aportadas por el usuario. En nuestro caso serán las seis conformaciones canónicas del ciclohexano: *chair* ( $D_{3d}$ ), *boat* ( $C_{2v}$ ), *twist-boat* ( $D_2$ ), *envelope* ( $C_s$ ), *half-chair* ( $C_2$ ) y *screw-boat* ( $C_2$ ), cuyos datos de ángulos de torsión se recogen en el capítulo siguiente.

**Utilizando la regla de Bayes se puede computar dada una secuencia observada  $(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)$ , la probabilidad que se genera a partir de la conformación C:**

$$P(C=c | \tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)) = p_c f(\tau, c) / (\sum_{c'=1, \dots, 6} p_{c'} f(\tau, c')).$$

La computación de estas probabilidades requiere la especificación de una distribución previa para  $(p_1, p_2, p_3, p_4, p_5, p_6)$  y para  $\sigma_c$ , la desviación estándar de las perturbaciones  $\varepsilon$ . En cuanto a las proporciones, se hace la elección  $p_c = 1/6$ , para  $c =$

1,....., 6, lo cual indica que, *a priori*, no se favorece una conformación canónica particular. Para  $\sigma_c$ , si se elige  $\sigma_c = 6$ , a partir de la conocida propiedad de la ley de Gauss, el 95% de los valores tomados por las perturbaciones permanecerán entre  $-20^\circ$  y  $20^\circ$ , lo cual parece un rango razonable de valores.

Se recomienda repetir el análisis para diferentes valores de  $\sigma_c$  con la finalidad de chequear que los resultados de la clasificación no son demasiado sensibles a los cambios según los valores de  $\sigma_c$ .

A continuación, como ejemplo, aplicamos el Método de Clasificación al compuesto de *refcode* ALPRCO, del cual se obtiene para  $\sigma = 10$ , *chair*, probabilidad 1.0000. Al aumentar el valor de  $\sigma$  disminuirá la probabilidad de la conformación *chair*, apareciendo nuevas conformaciones con probabilidad no nula.

El otro método queda fuera de nuestro alcance ya que su uso requiere un excesivo tiempo de cálculo.

### II.1.2.2.- Método para asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas

Un método para asignar la conformación más probable a cada una de las distintas estructuras obtenidas en la base de datos consiste en comparar el valor de los 6 ángulos de torsión de cada una de ellas con las 50 combinaciones de los valores teóricos de las 6 conformaciones definidas para anillos de seis miembros (Tabla 1):

C1	60	-60	60	-60	60	-60
C2	-60	60	-60	60	-60	60

B1	0	60	-60	0	60	-60
B2	60	-60	0	60	-60	0
B3	-60	0	60	-60	0	60
B4	0	-60	60	0	-60	60
B5	-60	60	0	-60	60	0
B6	60	0	-60	60	0	-60

TB1	33	33	-70	33	33	-70
TB2	33	-70	33	33	-70	33
TB3	-70	33	33	-70	33	33
TB4	-33	-33	70	-33	-33	70
TB5	-33	70	-33	-33	70	-33
TB6	70	-33	-33	70	-33	-33

E1	30	0	0	-30	60	-60
E2	0	0	-30	60	-60	30
E3	0	-30	60	-60	30	0
E4	-30	60	-60	30	0	0
E5	60	-60	30	0	0	-30
E6	-60	30	0	0	-30	60
E7	-30	0	0	30	-60	60
E8	0	0	30	-60	60	-30
E9	0	30	-60	60	-30	0
E10	30	-60	60	-30	0	0
E11	-60	60	-30	0	0	30
E12	60	-30	0	0	30	-60

HC1	45	-15	0	-15	45	-62
HC2	-15	0	-15	45	-62	45
HC3	0	-15	45	-62	45	-15
HC4	-15	45	-62	45	-15	0
HC5	45	-62	45	-15	0	-15
HC6	-62	45	-15	0	-15	45
HC7	-45	15	0	15	-45	62
HC8	15	0	15	-45	62	-45
HC9	0	15	-45	62	-45	15
HC10	15	-45	62	-45	15	0
HC11	-45	62	-45	15	0	15
HC12	62	-45	15	0	15	-45

SB1	40	0	-22	0	40	-60
SB2	0	-22	0	40	-60	40
SB3	-22	0	40	-60	40	0
SB4	0	40	-60	40	0	-22
SB5	40	-60	40	0	-22	0
SB6	-60	40	0	-22	0	40
SB7	-40	0	22	0	-40	60
SB8	0	22	0	-40	60	-40
SB9	22	0	-40	60	-40	0
SB10	0	-40	60	-40	0	22
SB11	-40	60	-40	0	22	0
SB12	60	-40	0	22	0	-40

**Tabla 1.- Valores teóricos de ángulos de torsión para las conformaciones del ciclohexano**

Para ello, utilizando el programa *Excel*, se define una función  $f$ , que aplicaremos 50 veces a cada uno de los  $n$  fragmentos que deseamos estudiar:

desde

$$f(1) = [((\$Bn-\$B\$1)^2+(\$Cn-\$C\$1)^2+(\$Dn-\$D\$1)^2+(\$En-\$E\$1)^2+(\$Fn-\$F\$1)^2+(\$Gn-\$G\$1)^2)^{0.5}$$

hasta

$$f(50) = [((\$Bn-\$B\$50)^2+(\$Cn-\$C\$50)^2+(\$Dn-\$D\$50)^2+(\$En-\$E\$50)^2+(\$Fn-\$F\$50)^2+(\$Gn-\$G\$50)^2)^{0.5}$$

Sea por ejemplo la estructura de *refcode* TUJWIE cuyos 6 ángulos de torsión son **-70.602, 55.343, -58.724, 55.945, -62.830 y 79.158°**.

Al aplicar  $f(1)$  estamos utilizando la primera serie de valores, definida en la Tabla 1 como C1:

$$f(1) = [(60 - (-70.602))^2 + (-60 - 55.343)^2 + (60 - (-58.724))^2 + (-60 - 55.945)^2 + (60 - (-62.830))^2 + (-60 - 79.158)^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 28.}$$

Al aplicar  $f(50)$  estamos utilizando la última serie de valores, definida como SB12:

$$f(50) = [(60 - (-70.602))^2 + (-40 - 55.343)^2 + (0 - (-58.724))^2 + (22 - 55.945)^2 + (0 - (-62.830))^2 + (-40 - 79.158)^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 107.}$$

El menor valor, 23, es el segundo, que corresponde a la configuración denominada C2. El segundo valor más bajo es 66 para la configuración HC5, y así sucesivamente hasta los 50 casos posibles. Estos datos coinciden plenamente con los obtenidos mediante el Método de Clasificación (para  $\sigma = 10$ ) para la misma estructura, como se calculó anteriormente (*chair* 1.0000).

Por tanto, a esta estructura, podemos asignarle una conformación *chair* en la que, además, sabemos que los ángulos de torsión tienen el orden correspondiente a C2, es decir, **-60, 60, -60, 60, -60, 60** (ver Tabla 4), valores relativamente aproximados a los experimentales recogidos arriba.

Este simple método permite, además, medir el grado de distorsión global de la conformación si aceptamos que, por ejemplo, para una deformación de entre 0 y 5° el valor calculado para ese intervalo varía entre 0 y  $[6 \times (5 - 0)^2]^{0.5} = 12.24$ .

De este modo los valores de la función variarán como se resume a continuación:



Variación de la deformación (°)	Intervalo de valores
0 → 5	0 → 12.24
5 → 10	12.25 → 24.48
10 → 15	24.49 → 36.72
15 → 20	36.73 → 48.96
20 → 25	48.97 → 61.20
25 → 30	61.21 → 73.44
30 → 35	73.45 → 85.68
35 → 40	85.69 → 97.93
40 → 45	97.94 → 110.16
45 → 50	110.17 → 122.40

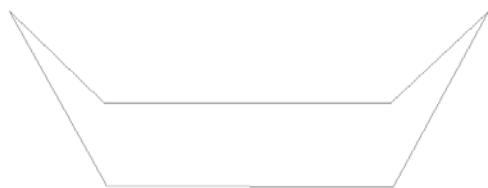
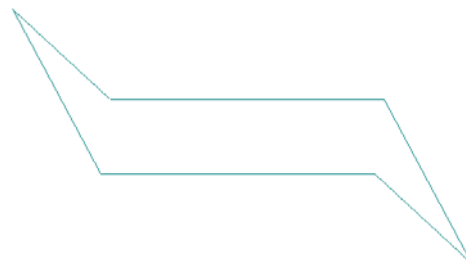
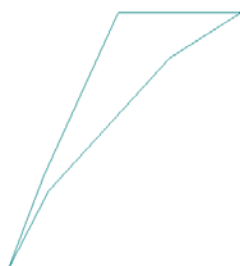
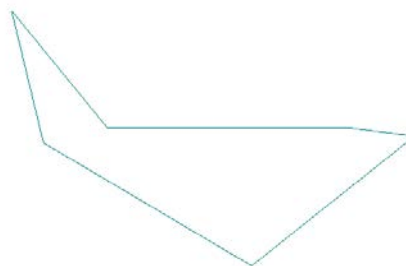
Por tanto, el valor de 23 obtenido para la conformación objeto de nuestro estudio se encuentra en el intervalo 12.25 → 24.48 correspondiente a una deformación comprendida entre 5 y 10° (10° aproximadamente). En definitiva, la conformación más probable la denominaremos “C2 deformada 10°”.

### II.1.3.- Las 6 conformaciones del ciclohexano generadas por el programa *Hyperchem*<sup>TM</sup>

Las figuras correspondientes a las 6 conformaciones del ciclohexano (ver página siguiente) se crearon mediante el software para modelado molecular *Hyperchem Release 7.01* (versión *Windows*) [*Hyperchem*<sup>TM</sup>]. Para ello, primero se construyó un anillo de seis miembros mediante las opciones *default element* y *model build* desde el menú *BUILD*. Seguidamente, seleccionando los valores de los ángulos de torsión propuestos por Hendrickson [Hendrickson, 1967], se crearon las distintas formas canónicas mediante la opción *constrain bond torsion* del mismo menú. Una vez fijados todos los ángulos de torsión para una figura determinada, se seleccionó la opción *add hydrogen & model build* dentro del menú *BUILD*. Así se obtuvieron, uno a uno, los 6 archivos (con la extensión *hin*) de las conformaciones. Estos archivos sólo se pueden abrir desde *Hy-*

*perchem*. Por ello, se convirtieron a otro formato mediante la opción *save as* del menú *FILE* del propio *Hyperchem*. En nuestro caso se pasó a la extensión *pdb* con la finalidad de poder dibujar las figuras con el programa *Windows*.

Las figuras creadas servirán de apoyo a la hora de visualizar con el programa *Mercury* las estructuras objeto de estudio y poder así contrastarlas con las obtenidas mediante el uso de los programas específicos explicados anteriormente.

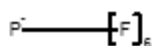
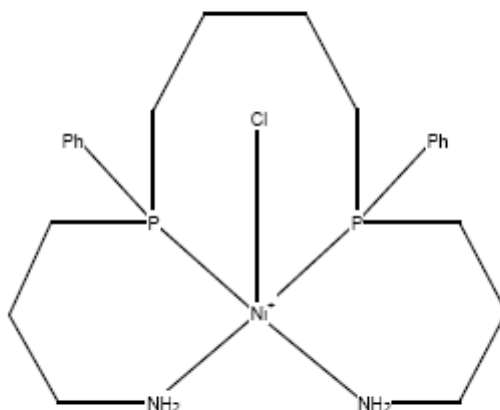
*boat**chair**envelope**half-chair**screw-boat**twist-boat*

**II.2.- SELECCIÓN DE LAS ESTRUCTURAS**

El programa *ConQuest* permite obtener los datos estructurales de cada uno de los compuestos seleccionados, presentándolos de la forma que se recoge en la Figura 10 para el compuesto de *refcode* TUJWIE.

**TUJWIE**

<b>Reference:</b>	K.Kashiwabara, M.Watanabe, M.Kita, T.Suzuki (1996) Bull. Chem. Soc. Jpn., <b>69</b> ,1947		
<b>Formula:</b>	C <sub>22</sub> H <sub>34</sub> Cl <sub>1</sub> N <sub>2</sub> Ni <sub>1</sub> P <sub>2</sub> 1 <sup>+</sup> F <sub>6</sub> P <sub>1</sub> 1 <sup>-</sup>		
<b>Compound Name:</b>	Chloro-(rac-4,9-diphenyl-4,9-diphosphadodecane-1,12-diamine)-nickel(II) hexafluorophosphate		
<b>Space Group:</b>	P21/n	<b>Cell:</b>	a 8.367(2) b 24.058(2) c 13.988(2)
<b>Space Group No.:</b>	14	<b>Cell:</b>	α 90.00 β 106.17(1) γ 90.00
<b>R-Factor (%):</b>	5.30	<b>Temperature(K):</b>	295
		<b>Density(g/cm<sup>3</sup>):</b>	1.541



**Figura 10.- Presentación de datos para la estructura de *refcode* TUJWIE.**

Los datos estructurales consisten en:

- *Refcode*
- Fórmula empírica
- Nombre del compuesto
- Sistema cristalino
- Parámetros de celda
- *R*-factor (%)
- Temperatura
- Densidad.

Utilizando el programa, con las condiciones de búsqueda señaladas anteriormente, y una vez depurados los datos obtenidos los resultados han sido los que se recogen en la tabla:

Quelato	Compuestos Fragmentos					
	níquel		paladio		platino	
N,N [1]	1300	1680	114	108	97	109
	2582	3319	198	256	136	152
P,P [2]	93	110	144	201	124	184
	164	220	184	271	175	264
O,O [3]	55	87	17	29	77	81
	128	181	18	33	86	91
S,S [4]	67	72	36	41	24	33
	114	120	64	72	38	49
	TOTAL					
	1515	1949	311	379	322	407
	2988	3940	464	632	435	556

Algunas estructuras se han tenido que eliminar por ser meras repeticiones de otras, lo que podría distorsionar los resultados estadísticos de los programas a aplicar.

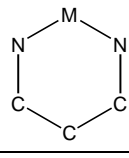
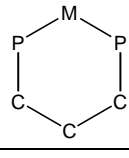
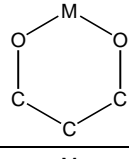
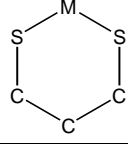
## Bibliografía II

- Allen, F.H y Motherwell, W.D.S. *Acta Cryst.* **B58**, 2002, 407-422.  
Allen, F.H y Taylor, R. *Chem. Soc. Rev.* **33**, 2004, 463-475.  
Bruno I.J; Cole J.C; Edgington P.R; Kessler M; Macrae C.F; McCabe P; Pearson J. y Taylor R. *Acta Cryst.* **B58**, 2002, 389.  
Hendrickson J. B.; *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 1967, 7047.  
Hyperchem<sup>TM</sup>; Hypercube Inc.: 1115 NW 4<sup>th</sup> Street, Gainesville, Florida 32601, USA  
Meyer, T.J. *Acc. Chem. Res.*, **22**, 1989, 163.  
Orpen, A. G. *Chem. Soc. Rev.* **pp**, 1993, 191-197.  
Pérez, J., Nolsøe, K., Kessler, M., García, L., Pérez, E. y Serrano, J.L. *Acta Cryst.* **B61**, 2005, 585-594.  
Zimmer, M. *Coord. Chem. Rev.* **212**, 2001, 133-163.

### III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### III.1.- APLICACIÓN DEL MÉTODO DE CLASIFICACIÓN

El resultado global de la búsqueda en la CSD, **actualizada**, recogido en el Capítulo II, es de **1949 compuestos (3940 fragmentos)** de níquel, **379 (632)** de paladio y **407 (556)** de platino. El desglose de éstos para los cuatro casos (N-N, P-P, O-O y S-S) se recoge en la tabla siguiente, en la que *Compuestos* indica cuántos datos se obtienen utilizando el programa ConQuest; *Datos disponibles* son los resultantes después de medir los ángulos de torsión (hay casos que no ofrecen resultados); *Datos (depurados)* ofrece el número definitivo de compuestos una vez eliminados los compuestos repetidos (tienen el mismo *refcode* porque se trata del mismo compuesto obtenido en condiciones diferentes); *Fragmentos* y *Fragmentos (depurados)* siguen el mismo criterio que los compuestos (su número es mayor porque, a veces, un compuesto tiene varios fragmentos). Los datos reflejados en **color negro** son los del **PFC de 2009** y en **color rojo** los del **Trabajo Fin de Estudios de 2014**:

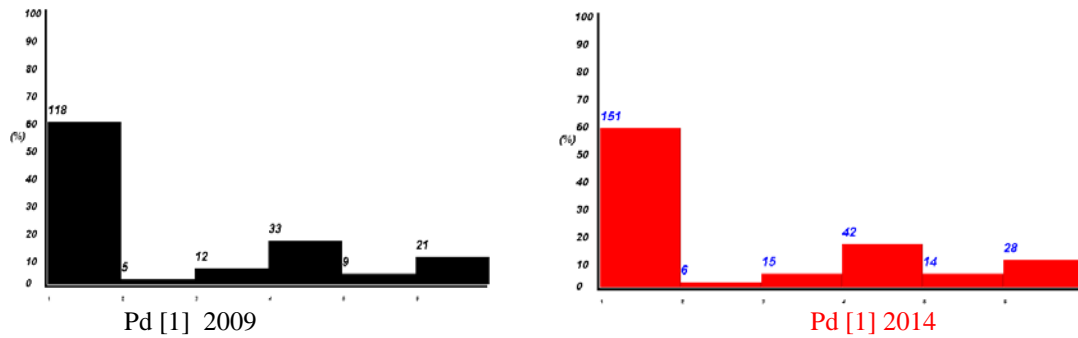
	Compuestos					
	Datos disponibles		Datos (depurados)		Fragmentos	
	Fragmentos (depurados)					
	níquel		paladio		platino	
	1507	1966	127	166	116	137
	1358	1792	121	154	99	115
	<b>1300</b>	<b>1680</b>	<b>114</b>	<b>108</b>	<b>97</b>	<b>109</b>
	2687	3525	210	268	138	161
	<b>2582</b>	<b>3319</b>	<b>198</b>	<b>256</b>	<b>136</b>	<b>152</b>
	109	126	153	211	141	204
	99	116	148	206	128	189
	<b>93</b>	<b>110</b>	<b>144</b>	<b>201</b>	<b>124</b>	<b>184</b>
	177	233	189	277	180	271
	<b>164</b>	<b>220</b>	<b>184</b>	<b>271</b>	<b>175</b>	<b>264</b>
	69	101	17	29	96	104
	61	92	17	29	81	86
	<b>55</b>	<b>87</b>	<b>17</b>	<b>29</b>	<b>77</b>	<b>81</b>
	134	188	18	33	92	97
	<b>128</b>	<b>181</b>	<b>18</b>	<b>33</b>	<b>86</b>	<b>91</b>
	81	86	42	45	30	42
	69	73	36	41	27	36
	<b>67</b>	<b>72</b>	<b>36</b>	<b>41</b>	<b>24</b>	<b>33</b>
	118	123	64	42	46	57
	<b>114</b>	<b>120</b>	<b>64</b>	<b>72</b>	<b>38</b>	<b>49</b>

Al aplicar el Método de Clasificación, descrito anteriormente, a las seis conformaciones del ciclohexano, con  $\sigma = 10^\circ$ , se obtienen los resultados que se recogen en la tabla siguiente para los complejos de níquel, paladio y platino (en columnas) y los quelatos N,N [1]; P,P [2]; O,O [3] y S,S [4]. Los datos en **color negro** son los del **PFC de 2009** y en **color rojo** los del **Trabajo Fin de Estudios de 2014**. No se ha realizado el estudio de los 3319 fragmentos N,N [1] ya que el Programa RingConf solo procesa 1000 estructuras.

quelato	conf.	níquel %	paladio %	platino %
N,N [1]	C	<b>60.88</b>	<b>59.60</b> <b>58.98</b>	<b>56.62</b> <b>55.26</b>
	B	<b>7.86</b>	<b>2.53</b> <b>2.34</b>	<b>2.94</b> <b>2.63</b>
	TB	<b>9.80</b>	<b>6.06</b> <b>5.86</b>	<b>18.38</b> <b>14.47</b>
	E	<b>13.44</b>	<b>16.67</b> <b>16.41</b>	<b>14.71</b> <b>17.11</b>
	HC	<b>5.03</b>	<b>4.55</b> <b>5.47</b>	<b>2.21</b> <b>3.95</b>
	SB	<b>2.98</b>	<b>10.61</b> <b>10.94</b>	<b>5.15</b> <b>6.58</b>
P,P [2]	C	<b>26.83</b> <b>24.55</b>	<b>46.20</b> <b>48.71</b>	<b>54.86</b> <b>59.85</b>
	B	<b>18.90</b> <b>21.82</b>	<b>2.72</b> <b>4.86</b>	<b>3.43</b> <b>2.65</b>
	TB	<b>34.76</b> <b>34.55</b>	<b>22.28</b> <b>18.82</b>	<b>13.14</b> <b>13.26</b>
	E	<b>17.07</b> <b>17.27</b>	<b>23.91</b> <b>21.77</b>	<b>21.71</b> <b>18.18</b>
	HC	<b>1.83</b> <b>1.36</b>	<b>4.35</b> <b>5.17</b>	<b>5.14</b> <b>4.55</b>
	SB	<b>0.61</b> <b>0.45</b>	<b>0.54</b> <b>0.74</b>	<b>1.71</b> <b>1.51</b>
O,O [3]	C	<b>14.06</b> <b>12.70</b>	<b>5.56</b> <b>3.03</b>	<b>2.33</b> <b>2.20</b>
	B	<b>28.13</b> <b>38.67</b>	<b>55.56</b> <b>42.42</b>	<b>50.00</b> <b>51.65</b>
	TB	<b>7.03</b> <b>4.97</b>	<b>0.00</b> <b>0.00</b>	<b>3.49</b> <b>3.29</b>
	E	<b>6.25</b> <b>4.42</b>	<b>11.11</b> <b>24.24</b>	<b>5.81</b> <b>5.49</b>
	HC	<b>14.06</b> <b>11.60</b>	<b>0.00</b> <b>0.00</b>	<b>0.00</b> <b>0.00</b>
	SB	<b>30.47</b> <b>27.62</b>	<b>27.78</b> <b>30.30</b>	<b>38.37</b> <b>37.36</b>
S,S [4]	C	<b>50.88</b> <b>50.00</b>	<b>68.75</b> <b>63.88</b>	<b>68.42</b> <b>53.01</b>
	B	<b>10.53</b> <b>13.13</b>	<b>10.94</b> <b>12.5</b>	<b>2.63</b> <b>4.08</b>
	TB	<b>20.18</b> <b>19.17</b>	<b>9.38</b> <b>11.11</b>	<b>2.63</b> <b>16.33</b>
	E	<b>12.28</b> <b>11.67</b>	<b>9.38</b> <b>11.11</b>	<b>21.05</b> <b>20.41</b>
	HC	<b>6.14</b> <b>5.83</b>	<b>0.00</b> <b>0.00</b>	<b>5.26</b> <b>4.08</b>
	SB	<b>0.00</b> <b>0.00</b>	<b>1.56</b> <b>1.38</b>	<b>0.00</b> <b>2.04</b>

En las páginas siguientes se recogen los histogramas de todos los fragmentos recogidos en la tabla.

## Fragmentos de paladio [1]

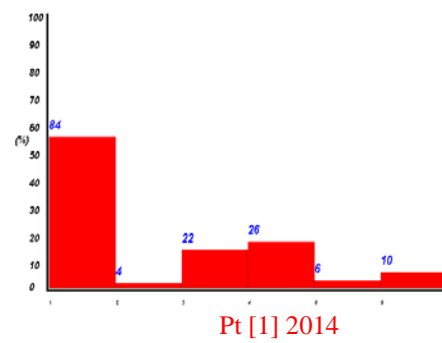
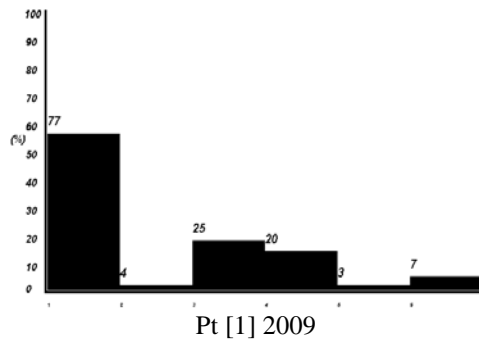


Conformaciones Pd [1] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	118 59.60%	151 58.98%
<i>boat</i> (B)	5 2.53%	6 2.34%
<i>twist-boat</i> (TB)	12 6.06%	15 5.86%
<i>envelope</i> (E)	33 16.67%	42 16.41%
<i>half-chair</i> (HC)	9 4.55%	14 5.47%
<i>screw-boat</i> (SB)	21 10.61%	28 10.94%
Fragmentos totales	198	256

Se ha producido un incremento del 30% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.



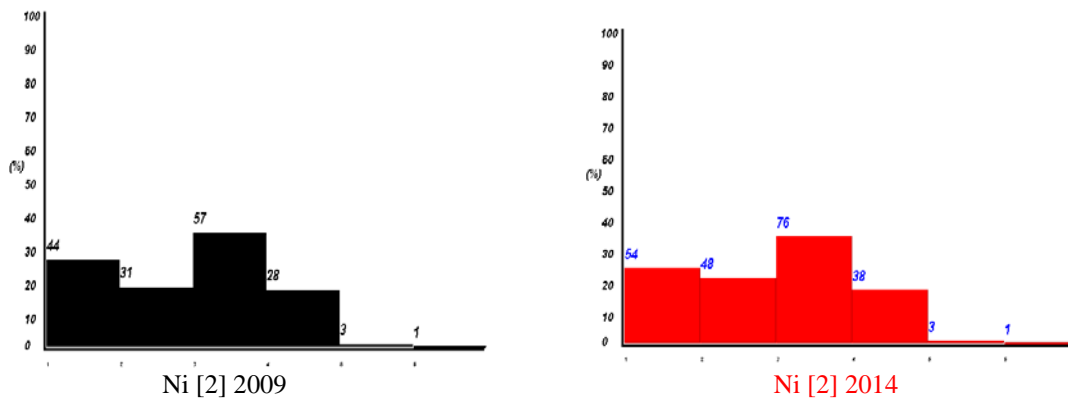
## Fragmentos de platino [1]



Conformaciones Pt [1] y %	Estudio2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	77 56.62%	84 55.26%
<i>boat</i> (B)	4 2.94%	4 2.63%
<i>twist-boat</i> (TB)	25 18.38%	22 14.47%
<i>envelope</i> (E)	20 14.71%	26 17.11%
<i>half-chair</i> (HC)	3 2.21%	6 3.95%
<i>screw-boat</i> (SB)	7 5.15%	10 6.58%
Fragmentos totales	136	152

Se ha producido un incremento del 12% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.

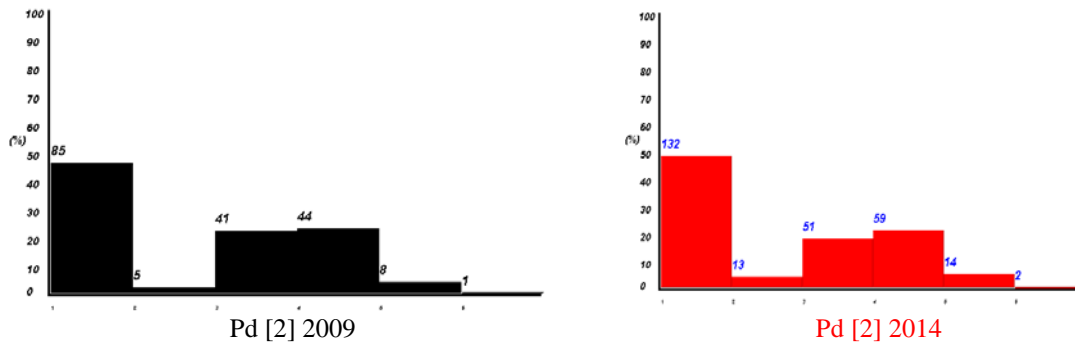
## Fragmentos de níquel [2]



Conformaciones Ni [2] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	44 26.83%	54 24.55%
<i>boat</i> (B)	31 18.90%	48 21.82%
<i>twist-boat</i> (TB)	57 34.76%	76 34.55%
<i>envelope</i> (E)	28 17.07%	38 17.27%
<i>half-chair</i> (HC)	3 1.83%	3 1.36%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 0.61%	1 0.45%
Fragmentos totales	164	220

Se ha producido un incremento del 34% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.

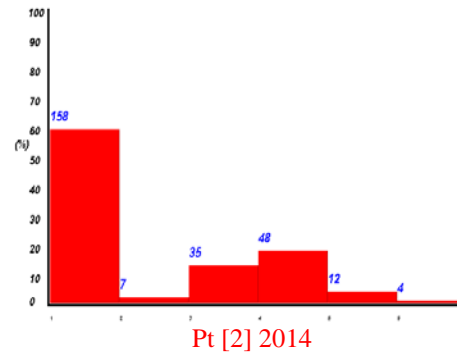
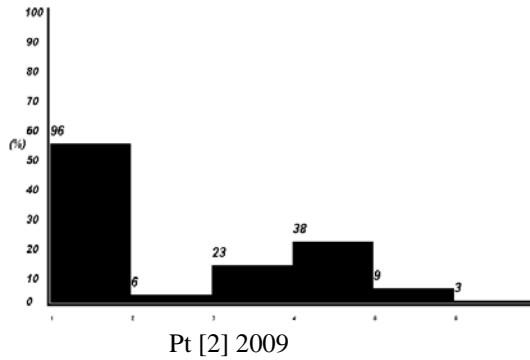
## Fragmentos de paladio [2]



Conformaciones Pd [2] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	85 46.20%	132 48.71%
<i>boat</i> (B)	5 2.72%	13 4.86%
<i>twist-boat</i> (TB)	41 22.28%	51 18.82%
<i>envelope</i> (E)	44 23.91%	59 21.77%
<i>half-chair</i> (HC)	8 4.35%	14 5.17%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 0.54%	2 0.74%
Fragmentos totales	184	271

Se ha producido un incremento del 47% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.

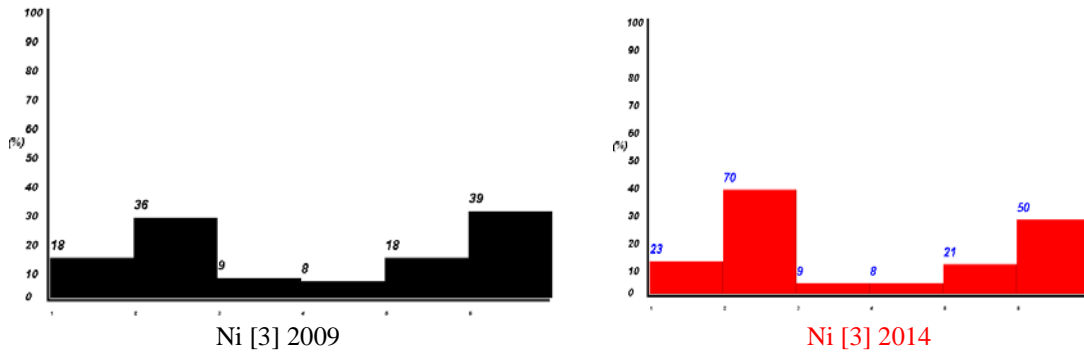
## Fragmentos de platino [2]



Conformaciones Pt [2] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	96 54.86%	158 59.85%
<i>boat</i> (B)	6 3.43%	7 2.65%
<i>twist-boat</i> (TB)	23 13.14%	35 13.26%
<i>envelope</i> (E)	38 21.71%	48 18.18%
<i>half-chair</i> (HC)	9 5.14%	12 4.55%
<i>screw-boat</i> (SB)	3 1.71%	4 1.51%
Fragmentos totales	175	264

Se ha producido un incremento del 51% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.

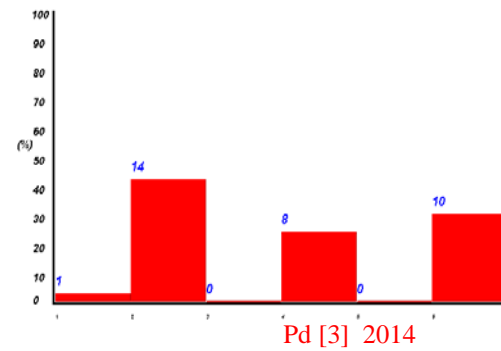
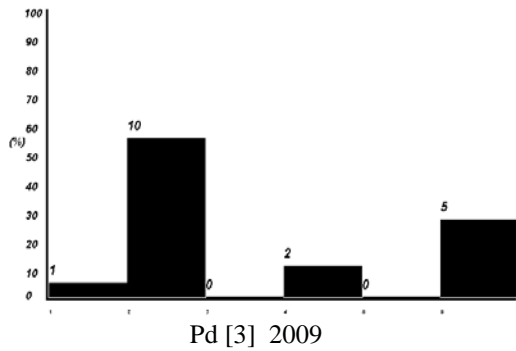
## Fragmentos de níquel [3]



Conformaciones Ni [3] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	18 14.06%	23 12.70%
<i>boat</i> (B)	36 28.13%	70 38.67%
<i>twist-boat</i> (TB)	9 7.03%	9 4.97%
<i>envelope</i> (E)	8 6.25%	8 4.42%
<i>half-chair</i> (HC)	18 14.06%	21 11.60%
<i>screw-boat</i> (SB)	39 30.47%	50 27.62%
Fragmentos totales	128	181

Se ha producido un incremento del 41% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja con la excepción de la conformación *boat* (28% a 39%).

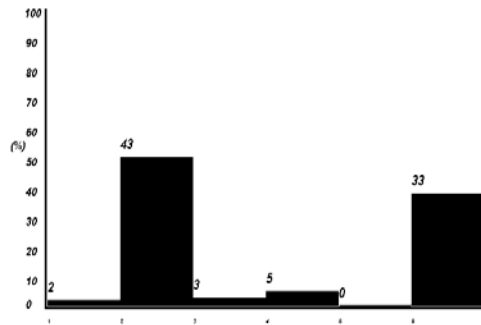
## Fragmentos de paladio [3]



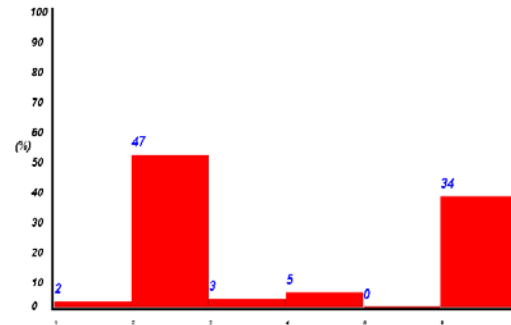
Conformaciones Pd [3] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	1 5.56%	1 3.03%
<i>boat</i> (B)	10 55.56%	14 42.42%
<i>twist-boat</i> (TB)	0 0.00%	0 0%
<i>envelope</i> (E)	2 11.11%	8 24.24%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0.00%	0 0%
<i>screw-boat</i> (SB)	5 27.78%	10 30.30%
Fragmentos totales	18	33

Se ha producido un incremento del 83% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja con la excepción de la conformación *boat*, que se reduce un 13%, y la *envelope* que aumenta en el mismo porcentaje.

## Fragmentos de platino [3]



Pt [3] 2009

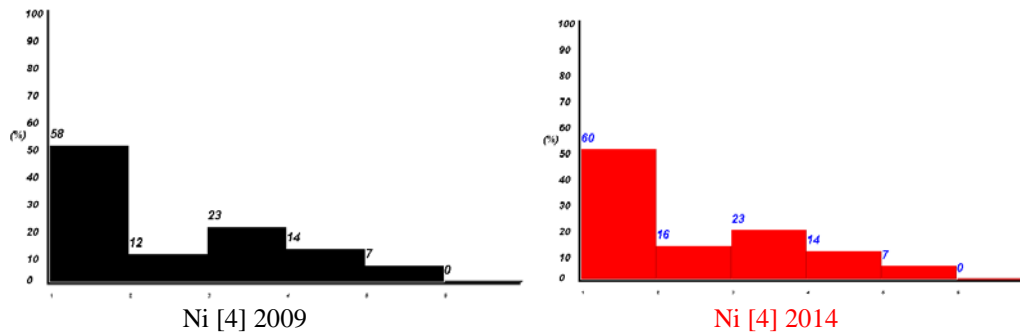


Pt [3] 2014

Conformaciones Pt [3] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	2 2.33%	2 2.20%
<i>boat</i> (B)	43 50.00%	47 51.65%
<i>twist-boat</i> (TB)	3 3.49%	3 3.29%
<i>envelope</i> (E)	5 5.81%	5 5.49%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0.00%	0 0%
<i>screw-boat</i> (SB)	33 38.37%	34 37.36%
Fragmentos totales	86	91

Se ha producido un incremento del 6% en el número de fragmentos por lo que no se debe realizar comparación alguna.

## Fragmentos de níquel [4]

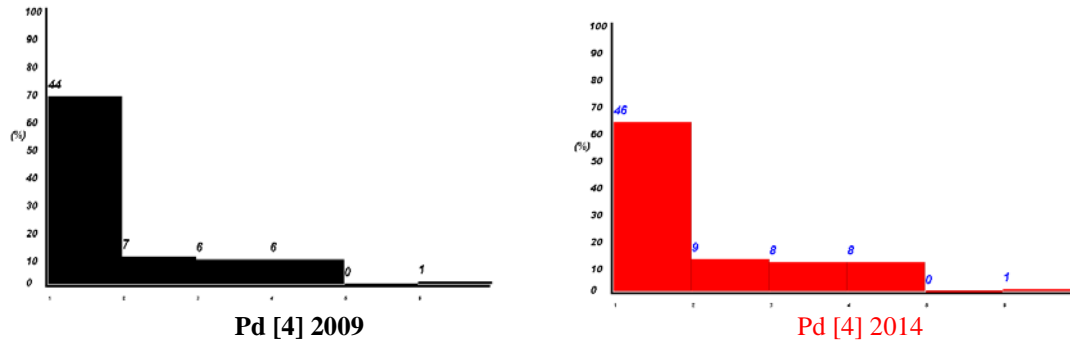


Conformaciones Ni [4] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	58 50.88%	60 50.00%
<i>boat</i> (B)	12 10.53%	16 13.13%
<i>twist-boat</i> (TB)	23 20.18%	23 19.17%
<i>envelope</i> (E)	14 12.28%	14 11.67%
<i>half-chair</i> (HC)	7 6.14%	7 5.83%
<i>screw-boat</i> (SB)	0 0.00%	0 0.00%
Fragmentos totales	114	120

Se ha producido un incremento del 5% en el número de fragmentos por lo que no se debe realizar comparación alguna.



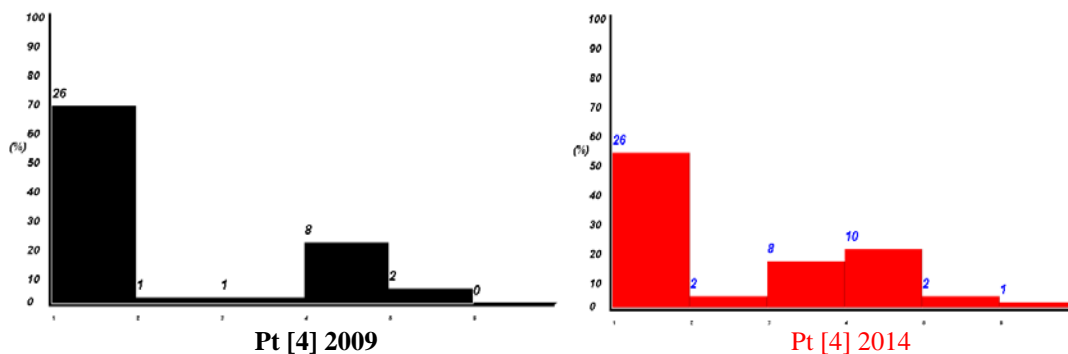
## Fragmentos de paladio [4]



Conformaciones <b>Pd [4]</b> y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	44 68.75%	46 63.88%
<i>boat</i> (B)	7 10.94%	9 12.5%
<i>twist-boat</i> (TB)	6 9.38%	8 11.11%
<i>envelope</i> (E)	6 9.38%	8 11.11%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0.00%	0 0.00%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 1.56%	1 1.38%
Fragmentos totales	64	72

Se ha producido un incremento del 12% en el número de fragmentos y la variación en el porcentaje de conformaciones es baja.

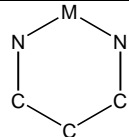
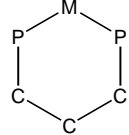
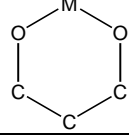
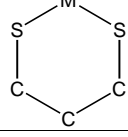
## Fragmentos de platino [4]



Conformaciones Pd [1] y %	Estudio 2009	Estudio 2014
<i>chair</i> (C)	26 68.42%	26 53.01%
<i>boat</i> (B)	1 2.63%	2 4.08%
<i>twist-boat</i> (TB)	1 2.63%	8 16.33%
<i>envelope</i> (E)	8 21.05%	10 20.41%
<i>half-chair</i> (HC)	2 5.26%	2 4.08%
<i>screw-boat</i> (SB)	0 0.00%	1 2.04%
Fragmentos totales	38	49

Se ha producido un incremento del 29% en el número de fragmentos, siendo significativo que no han aparecido nuevas conformaciones *chair* (descienden del 68% al 53%) y las *twist boat* pasan de 1 a 8 (el porcentaje aumenta del 3% al 16%). El resto, apenas varía.

En la tabla siguiente se resume el aumento y variación habidos, en porcentaje, de los fragmentos de los distintos casos estudiados:

	Aumento de fragmentos estudiados (%) y variación		
	níquel	paladio	platino
		30% baja	12% baja
	34% baja	47% baja	51% baja
	41% baja B ↑ 11%	83% B ↓ 13% E ↑ 13%	6% ---
	5% ---	12% baja	29% no nuevas C TB ↑ 13%

De todo ello podemos concluir que el número total de fragmentos para todos los compuestos estudiados ha aumentado un 32% (desde 3887 a 5128) y que la variación producida en las conformaciones ha sido baja.

En las tablas que se ofrecen a continuación se recogen los *refcode* de todos los fragmentos para los metales níquel, paladio y platino y, para cada uno de ellos, los cuatro casos posibles: N,N [1], P,P [2], O,O [3] y S,S [4] así como los resultados del Método de Clasificación para  $\sigma = 10^\circ$ . En **color rojo** se indican los nuevos fragmentos obtenidos en este Trabajo Fin de Grado:

**Paladio [1]**

Conf.	<i>Refcode</i>	Área de Estadística
	BAQGOP	1.0000 C
	BAQGUV-2	1.0000 C
	BEPLOY-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	BEPLUE-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	B-3	1.0000 C
	B-4	1.0000 C
	BEPMAL-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	BEPMEP-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	B-3	1.0000 C
	B-4	1.0000 C
	BEPMIT-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	BEQLUE-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	CBUXSES10	1.0000 C
	BUXSIW-1	1.0000 C
	B-2	1.0000 C
	BUXSOC-1	0.5145 C 0.4742 HC 0.0113 E
	B-2	1.0000 C
	CADYAS-1	1.0000 C
	CADJAS-2	1.0000 C
	CADKUN-1	0.8911 C 0.1237 HC 0.0752 E
	C-2	1.0000 C
	C-3	0.9994 C
C	C-4	0.9999 C
	CADLEY-1	1.0000 C
	C-2	1.0000 C
	DAMMPPD10-1	1.0000 C
	D-2	1.0000 C
	D-3	1.0000 C
	D-4	1.0000 C
	D-5	1.0000 C
	D-6	1.0000 C
	D-9	1.0000 C
	D-12	1.0000 C
	DUJSUW	1.0000 C
	EFIHUW-1	1.0000 C
	E-2	1.0000 C
	EHUNAW-1	1.0000 C
	E-2	1.0000 C
	FAZYEK-1	1.0000 C
	F-2	1.0000 C
	FEHJEI	1.0000 C
	FEHJIM	1.0000 C
	HDPDNT10	1.0000 C
	HOHSAZ	1.0000 C
	HOHSIZ	1.0000 C
	ILODIU-1	1.0000 C
	I-2	1.0000 C
	IROLAD	1.0000 C
	IROLEH-1	1.0000 C
	IROLEH-2	1.0000 C
	IXIIOD-1	1.0000 C

I-2	1.0000 C	
IXIYUJ-1	1.0000 C	
I-2	1.0000 C	
IXIYUJ-3	1.0000 C	
I-4	1.0000 C	
JEDDIF-1	1.0000 C	
J-2	1.0000 C	
JEVWOX-1	1.0000 C	
J-2	1.0000 C	
JEVWUD	1.0000 C	
JISTAH	1.0000 C	
KUWGUF	1.0000 C	
LELTUR-1	1.0000 C	
L-2	1.0000 C	
LUQWOK-1	1.0000 C	
LUQWOK-2	1.0000 C	
LUYCOX-1	1.0000 C	
L-2	1.0000 C	
LUYDEO	0.9953 C	0.0031 HC 0.0015 E
MOZYIJ	1.0000 C	
MORKUA-1	1.0000 C	
MORKUA-2	1.0000 C	
MORKUA-3	1.0000 C	
MORKUA-4	1.0000 C	
MORLAH-1	1.0000 C	
MORLAH-2	1.0000 C	
MORLEL	1.0000 C	
NABDAW-2	1.0000 C	
NAQZOV-3	1.0000 C	
OCIJOA	1.0000 C	
OJAVIF	1.0000 C	
PABJIM-1	1.0000 C	
P-2	1.0000 C	
QASKIF-1	1.0000 C	
Q-2	1.0000 C	
QILLOM-1	0.9995 C	
QILLUS-1	1.0000 C	
QILMAZ	1.0000 C	
REVQEO	1.0000 C	
ROMHEG-1	1.0000 C	
ROMHEG-2	1.0000 C	
RUMHEG-1	1.0000 C	
R-2	1.0000 C	
SEYPAN-1	1.0000 C	
S-2	1.0000 C	
S-3	1.0000 C	
S-4	1.0000 C	
S-5	1.0000 C	
S-6	1.0000 C	
SEYPER-1	1.0000 C	
S-2	1.0000 C	
TACVOI	1.0000 C	
TAFTUQ	1.0000 C	
TANXAI-1	1.0000 C	
T-2	1.0000 C	
TANXEM-1	1.0000 C	
T-2	1.0000 C	
TOBJEZ	1.0000 C	
TOBJID-2	1.0000 C	
TOBJID-4	0.9940 C	0.0052 HC
TOZYUC-2	1.0000 C	
UJUYUT-1	1.0000 C	
U-2	1.0000 C	
U-3	1.0000 C	
U-4	1.0000 C	
ANABAM	1.0000 C	
UNABEQ	1.0000 C	
UNABOA	1.0000 C	
UNACAM-1	1.0000 C	
U-2	1.0000 C	
U-3	1.0000 C	
VODXOC-1	1.0000 C	
VODXOC-2	1.0000 C	
VODXUI-1	1.0000 C	

	VODXUI-2 VODYAP-1 VODYAP-2 WUFVEY-1 W-2 W-3 WUTYOA XELSOX-1 X-2 X-3 X-4 YAZMAN YUVKAB ZIJZAT ZIQZAA-2 ZIQZEE-2 ZIQZII-2 ZIQZOO-1 Z-2 ZIQZUU-2	1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.7127 C 0.2326 E 0.0547 HC 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C
B	JOQQIP ZIQZAA-1 ZIQZEE-1 ZIQZII-1 ZIQZUU-1	1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B
TB	BAQGVU-4 DAGYUF FEJKUB KOMWUF LOFCOZ MUPBOO NAQZUB-4 TAFTIE TAFTOK TOBJOJ-1 T-2 YAZMER YAZPAR YAZPEV	0.9873 TB 0.0120 B 1.0000 TB 0.9957 TB 0.0043 B 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9994 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.8522 TB 0.1478 B 1.0000 TB 1.0000 TB
E	BIGMEJ CETNIZ CULLEA D-1 D-2 D-7 D-8 D-10 D-11 DACHPD DEPSAS GOSJED-1 G-2 G-3 HAPIPD10 JESBUF JOSYUL LADMIM MOZYEF NABDAW-1 NADFED NAQZOV-1 NAQZOV-2 OCEPER-1 O-2 PRBXP QOVRI QOVROI QOVROU SOFYOC-1 TOBJID-1 T-3 TOZYUC-1 UCOBAQ UKADALÇUNA-	0.9418 E 0.0582 HC 0.8886 E 0.1114 HC 1.0000 E 0.9436 E 0.0564 HC 0.9563 E 0.0437 HC 0.9355 E 0.0645 HC 0.8919 E 0.1078 HC 0.9678 E 0.0322 HC 0.9357 E 0.0641 HC 0.9764 E 0.0236 HC 0.9627 E 0.0371 HC 0.9938 E 0.0062 HC 0.9957 E 0.0043 HC 0.9970 E 0.0030 HC 0.8335 E 0.1496 HC 0.0169 C 0.9780 E 0.0166 HC 0.0054 SB 0.4951 E 0.4913 HC 0.0136 SB 0.9925 E 0.0075 HC 0.8524 E 0.1476 HC 0.9869 E 0.0130 HC 0.9975 E 0.0014 HC 0.0001 SB 0.9864 E 0.0135 HC 0.9979 E 0.0204 HC 0.9541 E 0.0457 SB 0.7608 E 0.2381 SB 0.0011 HC 0.8726 E 0.0882 HC 0.0392 C 0.7807 E 0.2193 HC 0.7069 E 0.2931 HC 0.9121 E 0.0879 HC 0.7457 E 0.2542 HC 0.9389 E 0.0596 SB 0.0016 HC 0.8469 E 0.1301 SB 0.0229 HC 0.6052 E 0.3948 HC 0.5446 E 0.3056 C 0.1497 HC 0.9874 E 0.0123 SB

	BIU UNABUG WUFQUK XUVQIU-1 X-2 X-3 X-4	0.9309 E 0.0691 HC 0.9494 E 0.0506 HC 1.0000 E 0.9861 E 0.0139 HC 0.9860 E 0.0140 HC 0.9760 E 0.0240 HC 0.9796 E 0.0204
HC	BAQGUV-3 EKAPUB HAKQIU ILIZUY-1 I-2 ILOBAM-2 LUGREO-1 L-2 PEVKEG QILLUS-2 S-2 UYANIS VIWSUP	0.9543 HC 0.0457 E 0.9838 HC 0.0162 E 0.9074 HC 0.0926 E 0.8558 HC 0.1339 E 0.0103 SB 0.7753 HC 0.1842 SB 0.0404 E 0.4814 HC 0.2838 HC 0.2348 SB 0.5051 HC 0.2639 E 0.2310 SB 0.5327 HC 0.3010 E 0.1663 SB 0.8112 HC 0.1693 E 0.0195 SB 0.5142 HC 0.4624 SB 0.0235 E 0.8201 HC 0.1243 E 0.0557 SB 0.9145 HC 0.0853 E 0.4466 HC 0.2919 E 0.2614 SB
SB	BAQGUV-1 DAGFEW HISTPD HIXXER ILOBAM-1 KEXMAC LUGRUE NAQZUB-1 N-2 N-3 NIMZAK NOLZAR-1 N-2 PYDCUB-1 P-2 QILLOM-2 RIRTER TOKKAG TORJUG VAKCAN VAKCER-1 V-2 WUGMAN WEDWUX-1 W-2 WEDXAE XIDDUK-1 X-2 BAQGUV-1 DAGFEW HISTPD HIXXER ILOBAM-1 KEXMAC NAQZUB-1 N-2 N-3 NIMZAK NOLZAR-1 N-2 PYDCUB-1 P-2 QILLOM-2 RIRTER WEDWUX-1 W-2 WEDXAE XIDDUK-1 X-2	0.9847 SB 0.0153 TB1 0.4524 SB 0.2928 E 0.2548 HC 0.9618 SB 0.0316 HC 0.0066 E 0.6834 SB 0.2463 HC 0.0703 E 0.9869 SB 0.0123 HC 0.9626 SB 0.0314 E 0.0059 B 0.5138 SB 0.4341 HC 0.0521 E 0.5837 SB 0.4002 E 0.0159 B 0.7369 SB 0.2544 TB 0.0087 B 0.9610 SB 0.0383 E 0.9912 SB 0.0063 HC 0.0025 E 0.9959 SB 0.0028 HC 0.0014 E 0.9209 SB 0.0770 HC 0.0021 E 0.9269 SB 0.0731 TB 0.8795 SB 0.1201 TB 0.9985 SB 0.7037 SB 0.2880 HC 0.0083 E 1.0000 SB 0.9887 SB 0.0108 HC 1.0000 SB 1.0000 SB 1.0000 SB 0.5358 SB 0.4599 E 0.0043 HC 0.9969 SB 0.0029 HC 0.7061 SB 0.2826 HC 0.0113 E 0.8674 SB 0.1220 E 0.0106 HC 0.8056 SB 0.1821 HC 0.0123 E 0.8024 SB 0.1826 HC 0.0150 E 0.9847 SB 0.0153 TB1 0.4524 SB 0.2928 E 0.2548 HC 0.9618 SB 0.0316 HC 0.0066 E 0.6834 SB 0.2463 HC 0.0703 E 0.9869 SB 0.0123 HC 0.9626 SB 0.0314 E 0.0059 B 0.5837 SB 0.4002 E 0.0159 B 0.7369 SB 0.2544 TB 0.0087 B 0.9610 SB 0.0383 E 0.9912 SB 0.0063 HC 0.0025 E 0.9959 SB 0.0028 HC 0.0014 E 0.9209 SB 0.0770 HC 0.0021 E 0.9269 SB 0.0731 TB 0.8795 SB 0.1201 TB 0.9985 SB 0.7037 SB 0.2880 HC 0.0083 E 0.9969 SB 0.0029 HC 0.7061 SB 0.2826 HC 0.0113 E 0.8674 SB 0.1220 E 0.0106 HC 0.8056 SB 0.1821 HC 0.0123 E 0.8024 SB 0.1826 HC 0.0150 E

## Platino [1]

Conf.	Refcode	Área de Estadística
	CAFWIQ	1.0000 C
	CAMFAX	1.0000 C
	CARSAP	1.0000 C
	CARSET	1.0000 C
	CARSIX	1.0000 C
	CENPIV	1.0000 C
	CIRKOE	1.0000 C
	DAHCIY	1.0000 C
	DANQAK	1.0000 C
	DOGZII	1.0000 C
	EMIFIP-2	1.0000 C
	EPEBOR-1	1.0000 C
	EPEBOR-2	1.0000 C
	FAJWOC	1.0000 C
	FENYAY	1.0000 C
	FENZAZ-1	1.0000 C
	FENZAZ-2	1.0000 C
	FEYXOW-1	1.0000 C
	FEYXOW-2	1.0000 C
	FUJCOC	1.0000 C
	FUYBIK	1.0000 C
	FUYDIM	0.8754 C 0.1017 E 0.0229 HC
	GADZEQ	1.0000 C
	GEWGUEU-2	1.0000 C
	GEWGIY	1.0000 C
	GICKUY	1.0000 C
	GISJOH	1.0000 C
	GOPJEA-1	1.0000 C
	GOPJEA-2	1.0000 C
	HABZIV	1.0000 C
	HOUTER	1.0000 C
	IFEGAC	1.0000 C
	KARZUY	1.0000 C
	KOBBIP-1	1.0000 C
	KOBBIP-2	1.0000 C
	LACQUC	0.9999 C
	LAYZEQ-1	0.9999 C
	LAYZEQ-2	0.9999 C
	NABRUD-1	1.0000 C
	NABRUD-2	1.0000 C
	NAVBOC	1.0000 C
	NAVBUI	1.0000 C
	NOTSUK	1.0000 C
	NOUBEF	1.0000 C
	PIFGIU	1.0000 C
	PIGJEU-1	1.0000 C
	PIGJEU-2	1.0000 C
	PIGJEU-3	1.0000 C
	PIGJEU-4	1.0000 C
	PIGJIY-1	1.0000 C
	PIGJIY-2	1.0000 C
	PNPTCCO1	1.0000 C
	RUTMEY	1.0000 C
	RUTMIC	1.0000 C
	SALRED	1.0000 C
	SALRIH	0.9917 C 0.0042 HC 0.0041 E
	SONNEO	1.0000 C
	SONNIS	1.0000 C
	TACVUO	1.0000 C
	TIHCAO	1.0000 C
	TUZYAO	0.9997 C
	TUZYES	0.9998 C
	VCIZUC	0.9370 C 0.0456 E 0.0174 HC
	VIHHUQ	0.8506 C 0.0919 E 0.0575 HC
	UCOBEV	1.0000 C
	VILHUT	1.0000 C
	VILJAB	1.0000 C
	VOZYUE	1.0000 C



	VOZZAL WEZWIH WIPNUE WIRHUA WUCLIP WUCLOV-1 WUCLOV-2 XIBRAC XIGBAQ XOGZOI YIDVUD-1 YIDVUD-2 ZAQWOD-1 ZAQWOD-2 ZUTMIF ZUTMOL	1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9820 C 0.0110 E 0.0070 HC 0.9745 C 0.0165 E 0.0090 HC 1.0000 C 1.0000 C
B	HACRAF-1 HACRAF-2 NUNTEV ZOPJET-1	0.9944 B 0.0056 TB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B
TB	CARSOP01-1 CARSOP01-2 CARSET01-1 CARSIX01-1 CARSIX01-2 GIMRID-1 GIMRID-2 GIMRID-3 GIMRID-4 GIMRID-5 GIMRID-6 HADCIZ-2 HADCIZ-3 HADCIZ-4 HADCIZ-5 HADCIZ-7 HADCIZ-8 HADCOF-1 HADCOF-2 HADCOF-3 HADCOF-4 IHICOR ZOPJET-2 ZOPJET-3 ZOPJET-4	0.8374 TB 0.1626 SB 0.9573 TB 0.0417 SB 1.0000 TB 0.9919 TB 0.0081 SB 0.6107 TB 0.3893 SB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9998 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9951 TB 0.0049 SB 0.9778 TB 0.0022 SB 1.0000 TB 1.0000 TB
E	BERDAE-1 BERDAE-2 EMIFIP-1 EVIRIL-1 EVIROR-1 EVIROR-2 FAMMIP GALYAT HADCIF-1 HADCIF-6 HADCIF-9 IHICUX JITVIR K UWQEZ-2 MEQGEV MLAMPT NAYFOJ NIHREB PAWWIU PAWWUG VAQVIT VIHHOK VIHJEC WUCLEL XIGBEU YABJAN	1.0000 E 1.0000 E 0.8904 E 0.1096 HC 1.0000 E 0.8659 E 0.1341 HC 0.8191 E 0.1809 HC 0.7605 E 0.2397 HC 0.9741 E 0.0256 HC 0.9756 E 0.0244 HC 0.8674 E 0.1325 HC 0.9561 E 0.0439 HC 0.8197 E 0.1803 HC 0.8162 E 0.1106 HC 0.0732 SB 0.8491 E 0.1509 HC 0.9569 E 0.3333 HC 0.0098 C 0.9897 E 0.0103 HC 0.9494 E 0.0506 HC 0.9695 E 0.0305 HC 0.9683 E 0.0317 HC 0.9616 E 0.0384 HC 0.9661 E 0.0336 HC 0.5762 E 0.4162 HC 0.0076 C 0.9766 E 0.0218 SB 0.0016 HC 0.9894 E 0.0106 HC 0.7154 E 0.2788 HC 0.0058 C 0.6378 E 0.2209 C 0.1413 HC
HC	EPUBOH-1 EPUBOH-2 EVIRIL-2	0.8835 HC 0.0807 E 0.0358 SB 0.7282 HC 0.2585 SB 0.0133 E 0.8933 HC 0.1058 E

	LACQOW	0.7096 HC	0.2904 E	
	PAWWOA	0.6432 HC	0.3123 E	0.0445 SB
	SUTSUV	0.8281 HC	0.1719 E	
SB	CARSETO1-2	0.7165 SB	0.2835 TB	
	FARYUS	0.9643 SB	0.0343 E	0.0015 HC
	GEWGEU-1	0.9758 SB	0.0193 HC	0.0049 E
	KUWQEZ-1	0.7065 SB	0.2664 HC	0.0270 E
	LORDEB-1	0.8796 SB	0.1180 HC	0.0025 E
	LORDEB-2	0.9984 SB	0.0016 HC	
	NOTZOL	0.9766 SB	0.0203 HC	0.0031 E
	ONIQIM	0.9518 SB	0.0394 HC	0.0088 E
	VIHJAY	0.9764 SB	0.0233 HC	
	XUKWUV	0.9907 SB	0.0084 HC	

## Níquel [2]

Conf.	Refcode	Área de Estadística		
C	BAXBUX	1.0000 C		
	BEVTAX-1	1.0000 C		
	BEVTAX-2	1.0000 C		
	BIKLIQ	1.0000 C		
	CAVGEM-1	1.0000 C		
	CAVGEM-2	1.0000 C		
	CIXVOV-1	1.0000 C		
	CIXVOV-2	1.0000 C		
	CIXVOV-3	1.0000 C		
	CUPROU-1	1.0000 C		
	CUPROU-2	1.0000 C		
	CUTZEW-1	1.0000 C		
	CUTZEW-2	1.0000 C		
	CUTZIA	1.0000 C		
	DIWBUG-1	0.9576 C	0.0218 HC	0.0207 E
	EGIWIB	1.0000 C		
	FEPQUN	1.0000 C		
	FOPZOC	1.0000 C		
	GAKDOL	0.9378 C	0.0438 E	0.0185 HC
	GESREB-1	1.0000 C		
	GESREB-2	1.0000 C		
	GUHKEZ	1.0000 C		
	LEZYAQ-1	1.0000 C		
	LEZYAQ-3	1.0000 C		
	LUCLUQ-1	1.0000 C		
	LUCLUQ-2	1.0000 C		
	MAPHIV-1	1.0000 C		
	MAPHIV-2	1.0000 C		
	MUPGAG-1	1.0000 C		
	NIMPDC	0.9998 C		
	PAYDIN-1	1.0000 C		
	PAYDIN-2	1.0000 C		
	PAJTID-2	0.9899 C	0.0066 E	0.0035 HC
	PUFNUZ	1.0000 C		
	OJEYOS	1.0000 C		
	OJEYUY-1	1.0000 C		
	OJEYUY-2	1.0000 C		
	OSIPAI	1.0000 C		
	QOSTAT	1.0000 C		
	QUKCII	1.0000 C		
	RAPTOS-1	1.0000 C		
	RAPTOS-2	1.0000 C		
	RUMYAA	1.0000 C		
	SOGLEF-2	1.0000 C		
	SOGLEF-4	1.0000 C		
	TEZHUB	1.0000 C		
	TOLNAJ	1.0000 C		
TOLNEN	1.0000 C			
UCUYOH	0.8691 C	0.0991 E	0.0317 HC	
UKEPEF	1.0000 C			
WAQVIT	1.0000 C			
XEYWAZ	0.9658 C	0.0282 E	0.0060 HC	
YAMSOV	0.4221 C	0.0338 E	0.0240 HC	

	ZOMMAP	0.9997 C
B	BUFREZ-1	0.9945 B 0.0029 TB 0.0026 SB
	BUFREZ-2	0.9939 B 0.0061 TB
	BUFREZ-3	1.0000 B
	CAWFIP-1	0.9361 B 0.0639 TB
	CAWFIP-3	0.8023 B 0.1970 TB
	CAWPIA	1.0000 B
	CIXVAH-1	0.9456 B 0.0544 TB
	CIXVAH-2	0.6314 B 0.3686 TB
	CIXVIP-1	1.0000 B
	CIXVIP-2	1.0000 B
	CIXVIP-3	1.0000 B
	CIXWEM-1	1.0000 B
	CIXWEM-2	1.0000 B
	CIXWEM-3	0.8557 B 0.1443 TB
	CIXWEM-4	0.8680 B 0.1318 TB
	DIVDIV-1	0.9854 B 0.0146 TB
	DIVDIV-2	0.9839 B 0.0161 TB
	DIVDIV-3	0.7025 B 0.2975 TB
	GEWVUZ-1	0.8695 B 0.1305 TB
	GEWVUZ-2	0.8870 B 0.1130 TB
	GEWVUZ-3	0.6940 B 0.3060 TB
	HERTII	1.0000 B
	HERTOD-1	0.9918 B 0.0081 TB
	HERVOQ	0.8224 B 0.1723 TB 0.0053 SB
	PMENIB20-1	0.6216 B 0.3784 TB
	PMENIB20-2	0.9063 B 0.0937 TB
	PMENIB20-3	0.9851 B 0.0149 TB
	PMEPNII0-1	0.9992 B
	PMEPNII0-2	0.9974 B 0.0026 TB
	PMEPNII0-3	0.9964 B 0.0036 TB
	P-4	1.0000 B
	P-5	1.0000 B
	P-6	1.0000 B
	PRHCOB10-1	0.9369 B 0.0631 TB
	PRHCOB10-2	0.9996 B
	PRHCOB10-3	0.9993 B
	SOGLEF-1	1.0000 B
	SOGLEF-3	1.0000 B
	TIBBUB-1	0.9820 B 0.0180 TB
	TIBBUB-3	0.9392 B 0.0608 TB
	XEVXAY-1	0.9988 B 0.0012 TB
XEVXAY-2	0.9988 B 0.0012 TB	
XEVXAY-3	0.9954 B 0.0046 TB	
XEVXAY-4	0.9999 B	
XEVXEC-1	0.9999 B	
XEVXEC-2	0.9996 B	
XEVXEC-3	1.0000 B	
XEVXEC-4	0.9849 B 0.0151 TB	
TB	BOMPIC-1	1.0000 TB
	BOMPIC-2	1.0000 TB
	BOMPIC-3	1.0000 TB
	CAFSOR-1	1.0000 TB
	CAFSOR-2	1.0000 TB
	CAFSOR-3	1.0000 TB
	CAWFIP-2	0.5053 TB 0.4947 B
	CAWPUG-1	0.9999 TB
	CAWPUG-2	1.0000 TB
	CIXTUZ-1	1.0000 TB
	CIXTUZ-2	1.0000 TB
	CIXTUZ-3	1.0000 TB
	CIXVAH-3	0.6657 TB 0.3343 B
	CIXVEL-1	1.0000 TB
	CIXVEL-2	1.0000 TB
	CIXVEL-3	1.0000 TB
	CIXVEL-4	1.0000 TB
	CIXVEL-5	1.0000 TB
	CIXVEL-6	1.0000 TB
	CIXWAI-1	1.0000 TB
	CIXWAI-2	1.0000 TB
	CIXWAI-3	1.0000 TB
CIXWEM-5	1.0000 TB	

	CIXWEM-6	1.0000 TB	
	CIXWEM-7	1.0000 TB	
	CIXXUD-1	1.0000 TB	
	CIXXUD-2	1.0000 TB	
	CIXXUD-3	1.0000 TB	
	CUGWOK-1	1.0000 TB	
	CUGWOK-2	1.0000 TB	
	CUGWOK-3	1.0000 TB	
	DIMFAG10-1	1.0000 TB	
	DIMFAG10-2	1.0000 TB	
	DIMFAG10-3	1.0000 TB	
	DPMENI10-1	1.0000 TB	
	DPMENI10-2	1.0000 TB	
	DPMENI10-3	1.0000 TB	
	DUMSUZ-1	1.0000 TB	
	DUMSUZ-2	1.0000 TB	
	DUMSUZ-3	1.0000 TB	
	FONMUQ-1	1.0000 TB	
	FONMUQ-2	0.9998 TB	
	FONMUQ-3	1.0000 TB	
	FUPZUF	0.9989 TB	0.0011 B
	HERTOU-2	0.9684 TB	0,0316 B
	HERTUU-1	1.0000 TB	
	HERTUU-2	1.0000 TB	
	HERVUW-1	0.9999 TB	
	HERVUW-2	1.0000 TB	
	HERVUW-3	1.0000 TB	
	HERVUW-4	1.0000 TB	
	KAWFEP	0.9979 TB	0.0021 B
	LEZYAQ-2	1.0000 TB	
	LEZYAQ-4	0.9999 TB	
	LEZROX-1	0.6562 TB	0.3438 SB
	OKUFUV	1.0000 TB	
	PMENSE-1	1.0000 TB	
	PMENSE-2	1.0000 TB	
	PMENSE-3	1.0000 TB	
	QUSTEX	1.0000 TB	
	QUSTIB	1.0000 TB	
	SXPMNI-1	1.0000 TB	
	SXPMNI-2	1.0000 TB	
	SXPMNI-3	1.0000 TB	
	TAHQAV	0.6692 TB	0.3308 B
	TIBBUB-2	0.7724 TB	0.2276 B
	TPHSNI-1	1.0000 TB	
	TPHSNI-2	1.0000 TB	
	TPHSNI-3	1.0000 TB	
	VALGEV	1.0000 TB	
	XAXQUJ-1	1.0000 TB	
	XAXQUJ-2	1.0000 TB	
	XAXQUJ-3	1.0000 TB	
	YUBGUR-1	0.9997 TB	
	YUBGUR-2	1.0000 TB	
	YUBGUR-3	0.9918 TB	0.0082 B
E	COKNEV	0.9590 E	0.0410 HC
	COPRNI	0.9445 E	0.0552 HC
	DEZHUL	0.9994 E	
	DIWBUG-2	0.9623 E	0.0377 HC
	ECLNIA	0.9928 E	0.0072 HC
	GESZEY	0.9662 E	0.0338 HC
	HAFZUK	0.9244 E	0.0722 HC 0.0034 C
	HAGBAT	0.8303 E	0.1689 HC
	HPCHPN-1	0.9763 E	0.0232 HC
	HPCHPN-2	0.0921 E	0.0409 SB 0.0369 HC
	JEGNAK	0.9667 E	0.0333 HC
	KESRUV	0.9451 E	0.0549 HC
	LIBDOP	0.9056 E	0.0944 HC
	MUPFOT-1	1.0000 E	
	MUPFOT-2	1.0000 E	
	MUPFOT-3	1.0000 E	
	MUPFOT-4	1.0000 E	
	MUPFUZ-1	1.0000 E	
	MUPFUT-2	1.0000 E	
	MUPFUT-3	1.0000 E	
	MUPFUT-4	1.0000 E	

	MUPGAG-2	1.0000 E
	MUPGAG-3	1.0000 E
	NIHBUB	0.9817 E 0.0183 HC
	PAJTID-1	0.9850 E 0.0150 HC
	PUJSOC-1	0.9174 E 0.0826 HC
	PUJSOC-2	0.8546 E 0.1453 HC
	PUPWEC	0.9960 E 0.0039 HC
	QUKCOO	0.6579 E 0.2226 HC 0.1195 C
	TAHRUO	0.9610 E 0.0390 HC
	TAHQEZ	0.9108 E 0.0892 HC
	TAHRUQ	0.5729 E 0.4081 HC 0.0190 C
	VALGAR	0.9321 E 0.0679 HC
	WIFNII	0.9306 E 0.0694 HC
	XAXRAQ	0.7931 E 0.2069 HC
	XIYPOK	0.9988 E 0.0112 HC
	ZOMET-1	0.8251 E 0.1745 HC
	ZOMET-2	0.8586 E 0.1413 HC
HC	LAVWAG	0.8427 HC 0.0698 E 0.0874 C
	LEZROX-2	0.5946 HC 0.4041 E 0.0013 C
	PUJSOC-3	0.9791 HC 0.0148 E 0.0061 SB
SB	BAXCAE	0.9987 SB

### Paladio [2]

Conf.	Refcode	Área de Estadística
	ACIVAJ	1.0000 C
	ACIVEN	1.0000 C
	AZIYUD-1	0.9999 C
	AZIYUD-2	0.9328 C 0.0417 E 0.0255 HC
	AZIZAK-1	1.0000 C
	AZIZAK-2	1.0000 C
	BOFHAG	1.0000 C
	CAKXER	0.8360 C 0.1132 E 0.0508 SB
	CEFYER	1.0000 C
	CEFYIV-1	1.0000 C
	COZNP-1	1.0000 C
	C-2	1.0000 C
	DABDAM	1.0000 C
	ELOSON-1	0.8468 C 0.1165 E 0.0367 HC
	ELOSON-2	0.9999 C
	ELOSUT-1	1.0000 C
	ELOSUT-2	0.9971 C 0.0017 E 0.0012 HC
	ELOTII	1.0000 C
	FEMSOG	1.0000 C
C	GICQAL	1.0000 C
	GICRAM	1.0000 C
	GULRIU-1	1.0000 C
	GULRIU-2	1.0000 C
	GUWQOF	1.0000 C
	HAKHAC-1	1.0000 C
	HAKHAC-2	1.0000 C
	HOQBUE	0.9952 C 0.0039 HC
	HOHAZ	1.0000 C
	HOHSIH	1.0000 C
	IDAMIY	0.7671 C 0.1562 E 0.0767 HC
	IHEKEM	1.0000 C
	JERDEQ	1.0000 C
	JIHJIT-1	1.0000 C
	JIHJIT-2	0.9570 C 0.0378 E 0.0053 HC
	J-3	1.0000 C
	J-4	1.0000 C
	KADKIK-1	0.9996 C
	KADKIK-2	1.0000 C
	KAHPOY	1.0000 C

KOKLAY-1	1.0000 C		
K-2	1.0000 C		
K-3	1.0000 C		
LAQDAI	1.0000 C		
LAYKEC	1.0000 C		
LEBBAW	1.0000 C		
LISCEV	1.0000 C		
LITEM	1.0000 C		
LOSDAY	0.9999 C		
LOSDEC	1.0000 C		
LOWVIC	1.0000 C		
LUKMAG-1	1.0000 C		
L-2	1.0000 C		
MAGDEE-1	0.9994 C		
MAGDEE-2	0.9025 C	0.0639 E	0.0336 HC
MIXFOP-1	1.0000 C		
M-2	1.0000 C		
M-3	1.0000 C		
M-4	1.0000 C		
MIXFUV-1	1.0000 C		
MIXFUV-2	0.9328 C	0.0553 E	0.0118 HC
MIXGAC-1	1.0000 C		
MIXGAC-2	1.0000 C		
MURLIV	1.0000 C		
MURLUA-1	1.0000 C		
MURLUA-2	1.0000 C		
MURLUG	1.0000 C		
MUXPEV-1	1.0000 C		
MUXPEV-2	1.0000 C		
MUMLUC-1	1.0000 C		
MUMLUC-2	1.0000 C		
N-3	1.0000 C		
N-4	1.0000 C		
NOM SIS-1	1.0000 C		
NOXPEV-1	1.0000 C		
NOXPEV-2	1.0000 C		
OJEC AI	1.0000 C		
PAVMEF-1	1.0000 C		
PAVMEF-2	1.0000 C		
PAVM IY-1	1.0000 C		
PAVM IY-2	0.9302 C	0.0603 E	0.0095 HC
QOCCEQ	1.0000 C		
QOC CIU	1.0000 C		
QOC DAN	1.0000 C		
QUGNIP	1.0000 C		
REKSAB	1.0000 C		
SAYHIY	1.0000 C		
SUDNAG	1.0000 C		
TADXON	1.0000 C		
TATXUH	1.0000 C		
TEKZUE	1.0000 C		
TEP XER	0.9991 C		
TOHNIN-1	1.0000 C		
TOHNIN-2	0.9977 C	0.0015 HC	
TOHNOT-1	1.0000 C		
UCANUH	0.9999 C		
UCUVEU	1.0000 C		
UMEDEV	0.9999 C		
UNACER	1.0000 C		
VAFKEU-1	1.0000 C		
VAFKEU-2	1.0000 C		
VAF LIZ	0.8958 C	0.0672 E	0.0370 HC
VULYEH-1	1.0000 C		
VULYEH-2	1.0000 C		
VULYEH-3	1.0000 C		
VULYEH-4	1.0000 C		
VULYIL-1	1.0000 C		
VULYIL-2	1.0000 C		
VUQR IJ-1	1.0000 C		
VUQR IJ-2	1.0000 C		
WOGNOV	1.0000 C		
WUMQEB	1.0000 C		
XAFREB	1.0000 C		
XAFY EY	1.0000 C		

	XAFYUZ XAFZAG XEBPEA-1 XEBPEA-2 XILXAR YADZIM YIIBOJ-1 YIIBOJ-2 YIIBUP-1 YIIBUP-2 YILDON YOKZAA YOKZEE YOKZUU YOSVOR YOSVUX ZAGCUF ZAGDAM ZUFGEM	1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9957 C 0.0040 HC 0.8194 C 0.1219 E 0.0588 HC 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9387 C 0.0526 HC 0.0087 E 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9999 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C
B	CASQES DPPPDC HACRAF-1 H-2 LEWQAF MISJEE MISRAI SOGLAB VAJHEU WAJGIZ-1 WAJGIZ-2 WAJGOF-1 WAJGOF-2	0.9950 B 0.0047 TB 0.9970 B 0.0029 TB 1.0000 B 1.0000 B 0.9995 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B
TB	BAVRIZ-1 B-2 B-3 BAVROF-1 B-2 B-3 BEVFED-1 B-2 B-3 B-4 BUGVUV BUGWAC BUGWEG-1 BUGWEG-2 DEPWUQ DEPXAX DPPPDN10 EKUQOR ELOTAA ELOTOO EMOJAR EMOKEW HOGBUA HUHZUF ILATUK JOCTAN KIHNAQ KIHNAQ01 KOMWUF LOFCOZ MADDEB MEKTAY OCIZEF PAQBIS PAQBOY PEYXEX PIBYUU-1 P-2 P-3 PIZZIH QELDIU RONPOZ	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9995 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9572 TB 0.0428 SB 0.9975 TB 0.0025 SB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9918 TB 0.0082 B 0.9991 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9994 TB 0.9941 TB 0.0059 B 0.9981 TB 0.0019 B 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9998 TB 1.0000 TB 0.9966 TB 0.0034 B 0.9740 TB 0.0260 B 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9987 TB 0.0013 B 0.9974 TB 0.0026 B 0.9999 TB

	RUDJAC	1.0000 TB		
	RUNVUR	0.9996 TB		
	TILJUT-1	1.0000 TB		
	T-2	1.0000 TB		
	TIYPAS	0.9967 TB	0.0033 B	
	TOHTOZ	1.0000 TB		
	WIKCEY	0.9942 TB	0.0058 B	
	WUMJOE-2	0.8272 TB	0.1728 B	
	ZUQXED	0.9697 TB	0.0173 SB	0.0130 B
	AGADOB	0.9575 E	0.0421 HC	
	AHAJEY	0.8641 E	0.1359 HC	
	AHAJOI	0.9625 E	0.0375 HC	
	AMACAS	0.9852 E	0.0148 HC	
	BAMQIP	0.9804 E	0.0110 SB	0.0087 HC
	BAMQOV	0.9769 E	0.0231 HC	
	BOZYAR	0.9202 E	0.0798 HC	
	CEFYIV-2	0.4865 E	0.4637 HC	0.0498 C
	CULLEA	0.9959 E	0.0040 HC	
	DUQMAE	0.9288 E	0.0538 HC	0.0174 C
	ELOTEE	0.9673 E	0.0327 HC	
	HUNJAB	0.9790 E	0.0210 HC	
	HUNJII	0.9439 E	0.0561 HC	
	JOZWIE	0.9944 E	0.0056 HC	
	FOQLIH-1	1.0000 E		
	F-2	1.0000 E		
	F-3	1.0000 E		
	F-4	1.0000 E		
	KONSAH-1	0.9951 E	0.0049 HC	
	K-2	0.9960 E	0.0040 HC	
	LISCAR	0.9942 E	0.0058 HC	
	MAGDII	0.9664 E	0.0336 HC	
	MEKTEC-1	0.9908 E	0.0092 HC	
	M-2	0.0088 E	0.0012 HC	
	MIGSEA	0.9144 E	0.0846 HC	0.0010 C
	NOMNIS-2	0.6610 E	0.2583 C	0.0806 HC
	OLANUL	0.8346 E	0.1654 HC	
	PAJTEZ-1	0.6366 E	0.1877 HC	0.1747 C
	P-2	0.7366 E	0.2596 HC	0.0028 C
E	PAKQIB	0.4707 E	0.4467 C	0.0827 HC
	PUCZAP	0.9606 E	0.0393 HC	
	QEJCIS-2	0.7556 E	0.2444 HC	
	QULMEP	0.7693 E	0.2305 HC	
	RIVZEC	0.9242 E	0.0757 HC	
	SEVVUL	0.9813 E	0.0187 HC	
	SEVWAS	0.8356 E	0.1603 HC	0.0041 SB
	SOBWOV-1	0.9946 E	0.0047 HC	
	S-2	0.9965 E	0.0035 HC	
	TAHQID	0.9636 E	0.0364 HC	
	TAHSEB	0.9003 E	0.0997 HC	
	TAWTOA-1	0.7212 E	0.2787 HC	
	T-2	0.8091 E	0.1632 HC	0.0277 C
	TOHNOT-2	0.8504 E	0.1108 HC	0.0388 C
	VAFKAQ	0.9583 E	0.0417 HC	
	VOTFUF	0.6128 E	0.2635 HC	0.1237 C
	WAJSUW	0.8534 E	0.1466 HC	
	WEWMIU-1	0.9958 E	0.0042 HC	
	W-2	0.8136 E	0.1864 HC	
	WEWMOA-1	0.9987 E	0.0011 HC	
	WIWSEA	0.9019 E	0.0980 HC	
	WUMJIY	0.9620 E	0.0379 HC	
	WUMJUK	0.9018 E	0.0981 HC	
	WUMKAR-1	0.9584 E	0.0416 HC	
	XEVBEQ	0.9849 E	0.0151 HC	
	XEXZOQ	0.5330 E	0.2780 C	0.1890 HC
	YADFAL	0.7691 E	0.2309 HC	
	YADFEP	0.8717 E	0.1082 HC	
	YIBMUR	0.9960 E	0.0040 HC	
	YIIBAV	0.9261 E	0.0739 HC	
HC	BUGUOP	0.7841 HC	0.2131 E	0.0028 SB
	CULLIE	0.7906 HC	0.2092 E	
	IPOLUU	0.6287 HC	0.3711 E	
	JOFYOT	0.4633 HC	0.4145 E	0.1223 C
	JOFZAG	0.8726 HC	0.1464 E	
	MAGDAA	0.5675 HC	0.4198 E	0.0127 SB



	PAIJOJ	0.9071 HC	0.0929 E	
	REJCIS-1	0.5099 HC	0.4901 E	
	WEWMOA-2	0.7590 HC	0.2374 E	0.0036 SB
	WUMJEU	1.0000 HC		
	WUMJOE-1	0.9078 HC	0.0919 E	
	WUMKAR-2	0.5328 HC	0.4649 E	0.0023 SB
	XULXUX	0.8214 HC	0.1786 E	
	YEWYIJ	0.7618 HC	0.2374 E	
SB	RUDHUU	0.6241 SB	0.3759 TB	
	YEYBIN	0.6834 SB	0.3080 HC	0.0146 E

## Platino [2]

Conf.	Refcode	Área de Estadística		
	ALAMIK-1	1.0000 C		
	A-2	1.0000 C		
	A-3	1.0000 C		
	A-4	1.0000 C		
	A-5	1.0000 C		
	A-6	1.0000 C		
	BEVDIQ-2	1.0000 C		
	BOPPEB20-1	1.0000 C		
	CIBDAS10	1.0000 C		
	CUVBAW	1.0000 C		
	DAFMAY	0.9317 C	0.0490 HC	0.0193 E
	DEXBIS	1.0000 C		
	DEXBOY-1	1.0000 C		
	EGUMAV	1.0000 C		
	EKOWUW-1	0.9562 C	0.0287 E	0.0151 HC
	EKOWUW-2	0.9999 C		
	EREDAH	1.0000 C		
	EREDEL	1.0000 C		
	EYESOQ-1	0.9996 C		
	EYESOQ-2	1.0000 C		
	EZIQUZ-1	1.0000 C		
	EZIQUZ-2	1.0000 C		
	EZIQUZ-3	1.0000 C		
	EZIQUZ-4	1.0000 C		
	FAQYAX	1.0000 C		
C	FEGJUX-1	0.9807 C	0.0167 E	0.0026 HC
	FEGKAE	1.0000 C		
	FESQOK-1	1.0000 C		
	FESQOK-2	1.0000 C		
	FOPZIT	1.0000 C		
	GAKRUH	1.0000 C		
	GAKSAO	0.9245 C	0.0522 E	0.0234 HC
	GAVFAK01	0.7382 C	0,1804 E	0.0814 HC
	GAVZEI	0.9960 C	0.0028 E	0.0012 HC
	GOMVUZ	1.0000 C		
	GUHQAC	1.0000 C		
	GUHQEC-1	1.0000 C		
	GUHQEC-2	1.0000 C		
	GUWQUL	1.0000 C		
	HAIWIY	0.9967 C	0.0018 HC	0.0016 E
	HEJSIY-1	1.0000 C		
	HEJSIY-2	0.9937 C	0.0050 E	0.0013 HC
	HIMFAL	1.0000 C		
	HIMFIT	1.0000 C		
	HOCHOX-1	1.0000 C		
	HOCHOX-2	1.0000 C		
	HOLGUK	0.9998 C		
	HOLHAR	1.0000 C		
	HUPHIK	1.0000 C		
	IFAMOR	1.0000 C		
	IROLAD	1.0000 C		
	IQUCEC-1	0.9980 C	0.0015 HC	

IQUCEC-2	0,9979 C	0.0020 HC	
JEWHOI-1	0.9624 C	0.0318 E	0.0058 HC
JEWHOI-2	1.0000 C		
JOLZAL	0.9987 C		
KECDOM	0.9600 C	0,239 HC	0.0161 E
KEXTIR	1.0000 C		
KOKLEL-1	1.0000 C		
KOKLEL-2	1.0000 C		
KOKLEL-3	1.0000 C		
KUSSOG	0.9999 C		
LACXOD-1	1.0000 C		
LACXOD-2	0.9999 C		
LALNOB-1	1.0000 C		
LALYED	0.7415 C	0.1715 E	0.0870 HC
LALYIH	0.9991 C		
LALYON	1.0000 C		
LEBBIE	1.0000 C		
LEWGOJ	0.9735 C	0.0222 E	0.0042 HC
LISNIL	1.0000 C		
LOTMEM	1.0000 C		
LOTMIQ-1	1.0000 C		
LOTMIQ-2	1.0000 C		
LUYZIP	1.0000 C		
MACMAG	1.0000 C		
MEDPAM	1.0000 C		
MPPRPT20-1	0.8574 C	0.789 HC	0.0636 E
MPPRPT20-2	0.7773 C	0.1631 E	0.0596 HC
NELTAA	1.0000 C		
NILKEZ-1	1.0000 C		
NOMSEO-1	1.0000 C		
OCUXIU-2	1.0000 C		
OMALOD	1.0000 C		
OMAMAQ	1.0000 C		
PACCEC-1	1.0000 C		
PACCEC-2	1.0000 C		
PITFED-1	1.0000 C		
PITFED-2	1.0000 C		
PITFUT-1	0.9569 C	0.0423 HC	
PITFUT-2	0.6925 C	0.2545 HC	0.0530 E
PIVROC-1	1.0000 C		
PIVROC-2	1.0000 C		
PIVROC-3	1.0000 C		
POBWAE	1.0000 C		
POJVEQ-1	0.9329 C	0.0575 E	0.0095 HC
POJVEQ-2	0.8534 C	0.0747 E	0.0717 HC
POJVEQ-3	1.0000 C		
POJVEQ-4	1.0000 C		
PONLUZ	1.0000 C		
PPETPT10-1	0.8174 C	0.1072 E	0.0753 HC
PPETPT10-2	0.9900 C	0.0063 HC	0.0037 E
QACKOW	1.0000 C		
QEXMAH-1	1.0000 C		
QEXMAH-2	1.0000 C		
QIXVUP	1.0000 C		
RALRIF	1.0000 C		
RALROL-1	1.0000 C		
RALROL-2	0.9999 C		
RALRUR-1	1.0000 C		
RALRUR-2	0.9994 C		
RALSAY-1	1.0000 C		
RALSAY-2	1.0000 C		
REKSEF	1.0000 C		
RINJED	1.0000 C		
SAPZEP	1.0000 C		
SEBQEW-1	1.0000 C		
SEBQEW-2	1.0000 C		
SEWFEG-1	0.9999 C		
SIWNAN	1.0000 C		
TAJHIX-1	1.0000 C		
T-2	1.0000 C		
T-3	1.0000 C		
T-4	1.0000 C		
TIJRUZ	1.0000 C		
TIMNUZ-1	1.0000 C		

	TIMNUZ-2	1.0000 C	
	TIMNUZ-3	0.8843 C	0.0897 E 0.0260 HC
	TIMNUZ-4	0.7785 C	0.1679 E
	UFOQOU-1	0.9995 C	
	UFOQOU-2	0.9997 C	
	UFOQUB	1.0000 C	
	UFOREM-1	1.0000 C	
	UFOREM-2	0.9999 C	
	UNIGAA	1.0000 C	
	VAFKIY	1.0000 C	
	VAFKUK	1.0000 C	
	VOCBUL-1	1.0000 C	
	V-2	1.0000 C	
	WONNUJ	1.0000 C	
	XAFXUY	1.0000 C	
	XAFYAF	1.0000 C	
	XAVMOX	1.0000 C	
	XIDKOL	1.0000 C	
	XITREY	1.0000 C	
	YAXJIOX	0.9640 C	0.0253 E 0.0108 HC
	YOKZII	1.0000 C	
	YOKZOO	1.0000 C	
	YOLBAD	1.0000 C	
	YOXQOS-1	1.0000 C	
	YOXQOS-2	1.0000 C	
	YOXQUY	1.0000 C	
	YOXRAF-1	1.0000 C	
	YOXRAF-2	1.0000 C	
	YOXREJ	1.0000 C	
	ZAGCIT-1	1.0000 C	
	ZAGCIT-2	1.0000 C	
	ZIQQIZ	1.0000 C	
B	FONKOI	0.9991 B	
	HAYRQO	1.0000 B	
	HOLGOK	0.9489 B	0.0476 TB 0.0035 SB
	THOSPT-1	0.9999 B	
	UGUNAL	0.9739 B	0.0254 TB
	QOCQEF	1.0000 B	
	WIXSUR	1.0000 B	
TB	BEVDIQ-3	0.9998 TB	
	BUGVUV	1.0000 TB	
	BUSLEG-1	1.0000 TB	
	BUSLEG-2	1.0000 TB	
	BUSLEG-3	1.0000 TB	
	CAQXEY	1.0000 TB	
	FUDROM	1.0000 TB	
	FUDRUS	1.0000 TB	
	FUDSED	1.0000 TB	
	FUDSIH	1.0000 TB	
	HUGQOP	1.0000 TB	
	JOFZEK	1.0000 TB	
	LEZSIS-1	1.0000 TB	
	LEZSIS-2	1.0000 TB	
	PODCUG	0.9725 TB	0.0275 SB
	PUJJIN-1	0.9997 TB	
	PUJJIN-2	0.9997 TB	
	THOSPT-3	0.9939 TB	0.0061 B
	VEMWIU-2	0.8577 TB	0.1423 B
	VEMWOA-2	0.9408 TB	0.0592 B
	VEMWOA-3	1.0000 TB	
	WIJZUK-1	1.0000 TB	
	WIJZUK-2	0.9989 TB	0.0011 B
	WIKDID-1	0.9938 TB	0.0062 B
	WIXQID-2	1.0000 TB	
	YIWRAY	1.0000 TB	
	YIWREC	1.0000 TB	
	YUDWEA	1.0000 TB	
	YUDWIE	1.0000 TB	
	YUDWOK	1.0000 TB	
	YUDWUQ	1.0000 TB	
	YUKYOS-1	1.0000 TB	
	YUKYOS-2	1.0000 TB	
	YUKYOS-3	1.0000 TB	
	ZUXPIR-2	1.0000 TB	

E	AHAJIC	0.8955 E	0.1045 HC	
	BATKOX	0.9556 E	0.444 HC	
	BPHPPT-1	0.9930 E	0.0070 HC	
	BPPRPT-3	0.9200 E	0.7795 HC	
	BPPRPT-4	0.9880 E	0.0120 HC	
	<b>BUPRPT</b>	<b>0.9880 E</b>	<b>0.0120 HC</b>	
	DEXBEO-1	0.9824 E	0.0176 HC	
	DEXBEO-2	0.9973 E	0.0027 HC	
	DEXBOY-2	0.8582 E	0.0800 HC	0.0618 C
	FEGJUX—2	0.9474 E	0.0526 HC	
	<b>GUWRIA</b>	<b>0.5436 E</b>	<b>0.4341 HC</b>	<b>0.0223C</b>
	HAIWOE	0.9467 E	0.0527 HC	
	JOZQOE-2	0.9794 E	0.0206 HC	
	KAMDOS	0.7327 E	0.1867 C	0.0805 HC
	KILKOF	0.9867 E	0.0133 HC	
	KILKOF10-1	0.9946 E	0.0054 HC	
	KILKOF10-2	0.9882 E	0.0118 HC	
	KITNUC	0.9958 E	0.0042 HC	
	KUKVUH	0.9964 E	0.0036 HC	
	LALNOB-2	0.9587 E	0.0413 HC	
	LIBDUV	0.9808 E	0.0192 HC	
	<b>LISNEH</b>	<b>0.4136 E</b>	<b>0.3739 C</b>	<b>0.2125 HC</b>
	NAJQOE	0.8966 E	0.1034 HC	
	NAJQOK	0.9663 E	0.0336 HC	
	NEWCOH	0.9004 E	0.0996 HC	
	<b>NILKEZ-2</b>	<b>0.5439 E</b>	<b>0.3943 C</b>	<b>0.1518 HC</b>
	<b>NOMSEO-2</b>	<b>0.5988 E</b>	<b>0.3283 C</b>	<b>0.0728 HC</b>
	NUGCOH	0.9689 E	0.0311 HC	
	OCUXIU-1	0.7556 E	0.1840 HC	0.0605 C
	PUPWIG-1	0.9296 E	0.0703 HC	
	PUPWIG-2	0.9961 E	0.0039 HC	
	QULMIT	0.7517 E	0.2482 HC	
	QULMOZ	0.9461 E	0.0539 HC	
	QULMUF	0.9225 E	0.0775 HC	
	<b>RIZQIB</b>	<b>0.8782 E</b>	<b>0.1218 HC</b>	
	SEWIIC	0.9272 E	0.0663 HC	0.0065 C
TEPFEZ	0.9907 E	0.0093 HC		
TEPFID-2	0.6003 E	0.3934 HC		
<b>VAFJUI</b>	<b>0.9563 E</b>	<b>0.0437 HC</b>		
VIPMUC	0.8624 E	0.1375 HC		
<b>VOPROI</b>	<b>1.0000 E</b>			
<b>VOPRUO-1</b>	<b>0.9101 E</b>	<b>0.0899 HC</b>		
<b>VOPRUO-2</b>	<b>0.8110 E</b>	<b>0.1889 HC</b>		
XEKJEC	0.9324 E	0.0676 HC		
XEKJIG	0.9695 E	0.0305 HC		
XIDKUR	0.7167 E	0.2815 HC	0.0018 SB	
XOTSAA	0.9351 E	0.0648 HC		
YOMQEW	0.9943 E	0.0057 HC		
HC	BEVDIQ-1	0.7673 HC	0.1696 E	0.031 C
	BOPPEB20-2	4641 HC	0.4078 C	0.1281 E
	GERHAN	0.6328 HC	0,3672 E	
	<b>HUXMAP</b>	<b>0.7125 HC</b>	<b>0.2828 E</b>	<b>0.0047 SB</b>
	JOZQOE-1	0.7495 HC	0.2379 E	0.0125 SB
	KUKWAO	0.7628 HC	0.2278 E	0.0094 SB
	SEWFEG-2	0.9580 HC	0.0287 E	0.0133 C
	TEPFID-1	0.7953 HC	0.1708 E	0.0338 SB
	VEMWIU-1	0.9499 HC	0.0501 E	
	VEMWOA-1	0.9171 HC	0.0829 E	
<b>VIWSUP</b>	<b>0.4466 HC</b>	<b>0.2919 E</b>	<b>0.2614 SB</b>	
<b>WUMJOE-1</b>	<b>0.9078 HC</b>	<b>0.0919 E</b>		
SB	BPPRPT-2	0.5582 SB	0.3427 HC	0.0992 E
	<b>HUXMET</b>	<b>0.9375 SB</b>	<b>0.0327 E</b>	<b>0.0297 HC</b>
	THOSPT-2	0.5178 SB	0.3024 TB	0.1798 B
	ZUXPIR-1	0.5762 SB	0.4163 HC	0.0075 E

## Níquel [3]

Conf.	Refcode	Área de Estadística
C	AGIDEZ	1.0000 C
	BIZWEM	0,9989 C
	DEGROW	1.0000 C
	EZIGAV-1	1.0000 C
	EZIGAV-2	1.0000 C
	HUHNE-6	0.9503 C 0.0473 HC 0.0024 E
	LENQOK-1	1.0000 C
	LENQOK-2	1.0000 C
	LENQOK-3	1.0000 C
	LUCLUQ-1	1.0000 C
	LUCLUQ-2	1.0000 C
	NICITA-3	1.0000 C
	RELD-1	1.0000 C
	RELD-2	1.0000 C
	RELD-3	1.0000 C
	SAVBIB-1	1.0000 C
	SAVBIB-2	1.0000 C
	SAVBIB-3	1.0000 C
	XEZFIR-6	0.5829 C 0.4089 HC 0.0082 E
	XIBJEY	1.0000 C
YULKAS-1	1.0000 C	
YULKAS-2	1.0000 C	
YULKAS-3	1.0000 C	
B	AMIMIS	1.0000 B
	BEWKIX	1.0000 B
	BOWCOF	1.0000 B
	CEHVUH-2	0.7169 B 0.2585 SB 0.0246 TB
	CIYJIE	1.0000 B
	DOFYIH	1.0000 B
	DUVTUK-1	1.0000 B
	DUVTUK-2	1.0000 B
	DUVTUK-3	1.0000 B
	DUVTUK-4	1.0000 B
	DUVTUK-5	1.0000 B
	DUVTUK-6	1.0000 B
	EQUISAZ-1	1.0000 B
	FOTQEL	1.0000 B
	FRCTNI	1.0000 B
	GAF-1	1.0000 B
	GEWQOO	1.0000 B
	HUHNE-9	0.9999 B
	HUHNIH-9	1.0000 B
	HUPQOY-2	1.0000 B
	HUPQUE-1	0.9916 B 0.0082 SB
	HUPQUE-3	0.9734 B 0.0229 SB 0.0037 SB
	HUPQUE-4	0.7417 B 0.2048 TB 0.0535 SB
	HUPQUE-5	1.0000 B
	HUPQUE-6	0.9995 B
	HUPQUE-7	0.6386 B 0.3164 SB 0.0450 TB
	HUPQUE-8	1.0000 B
	IJOVUY	1.0000 B
	IJOWAF	1.0000 B
	KEXKII-1	1.0000 B
	KEXKII-2	1.0000 B
	NICITA-1	0.9995 B
	NICITA-2	0.9981 B 0.0017 TB
	SITXOJ	1.0000 B
	SIVHEL	1.0000 B
	SOGLAB	1.0000 B
TUXJUS	1.0000 B	
TUXKAZ	1.0000 B	
TUXKED	1.0000 B	
OGIHUH	1.0000 B	
PEWHAG	0.9995 B	
UMABUG-1	1.0000 B	
UMABUG-2	1.0000 B	
UMIYOZ-1	1.0000 B	
UMIYOZ-2	1.0000 B	
UMIYOZ-3	1.0000 B	
UMIYOZ-4	1.0000 B	

	VEZFOV XEVXAY-1 XEVXAY-2 XEVXAY-3 XEVXAY-4 XEVXEC-1 XEVXEC-2 XEVXEC-3 XEVXEC-4 XEZFIR-9 XIBJAU XOVWAH-1 XOVWAH-2 XOVWAH-3 YULKEW-1 YULKEW-2 YULKEW-3 YULKIA-1 YULKIA-2 YULKIA-3 YULKOG-1 YULKOG-2 YULKOG-3	1.0000 B 0.9988 B 0.0012 TB 0.9988 B 0.0012 TB 0.9954 B 0.0046 TB 0.9999 0.9999 B 0.9996 B 1.0000 B 0.9849 B 0.0151 TB 0.7299 B 0.2687 SB 0.0010 TB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B
TB	CEHVUH-1 HUHNED-4 HUOQUE-9 HUPQOY-4 NICITA-5 XEZFIR-4 XEZFOX-1 XEZFOX-5 XEZFOX-6	0.9766 TB 0.0227 SB 0.7393 TB 0.2607 SB 0.9965 TB 0.0035 SB 0.9999 TB 0.9981 TB 0.0017 SB 0.9800 TB 0.0200 SB 0.5276 TB 0.4724 SB 0.9989 TB 0.9933 TB 0.0067 B
E	HUHNED-10 MEPDER MUSQUM NASCUF PEZTAQ XEZFIR-8 XEZFOX-3 XEZFOX-9	0.8087 E 0.1905 HC 0.9212 E 0.0700 HC 0.0018 SB 0.9930 E 0.0070 HC 0.5355 E 0.2969 HC 0.1676 SB 0.5698 E 0.4052 SB 0.0249 HC 0.5389 E 0.4603 HC 0.9312 E 0.0688 HC 0.5693 E 0.3597 HC 0.0709 SB
HC	BULTAD EXENIE HUHNED-8 HUHNIH-3 HUHNIH-6 HUHNIH-8 HUHNIH-10 HUPQOY-3 MEHZEE NASDAM NICITA-4 NICITA-6 RABJIP-1 RABJIP-2 QEXQEQ-2 UDUXAS UQAQAF XEZFIR-3 XEZFIR-10 XEZFOX-8 YIDHEZ	0.9633 HC 0.0366 E 0.6543 HC 0.3300 SB 0.0157 E 0.7291 HC 0.2706 E 0.7172 HC 0.2684 SB 0.0144 E 0.9635 HC 0.0364 E 0.6578 HC 0.3421 E 0.8235 HC 0.1765 E 0.8596 HC 0.1360 E 0.0045 SB 0.9775 HC 0.0225 E 0.9522 HC 0.9476 E 0.5889 HC 0.4073 E 0.0038 SB 0.9070 HC 0.0693 SB 0.0237 E 0.7115 HC 0.2885 E 1.0000 HC 0.6383 HC 0.3097 SB 0.0520 E 0.5405 HC 0.3891 E 0.0703 C 0.8890 HC 0.1001 E 0.0109 SB 0.6388 HC 0.2511 SB 0.1102 E 0.5073 HC 0.4926 E 0.8129 HC 0.1146 SB 0.0725 E 0.9861 HC 0.0135 E
SB	ATUPUA BHEXNI CIYJEA COLZIN COMJIY DAYXUX01 EQUISAZ-2 FAWNUM FONBAM GIQNAW HUHNED-1 HUHNED-2 HUHNED-3	0.9789 SB 0.0169 HC 0.0042 E 0.9997 SB 1.0000 SB 1.0000 SB 1.0000 SB 1.0000 SB 0.9179 SB 0.0659 E 0.0162 HC 0.9893 SB 0.0089 B 0.0018 TB 0.0078 SB 0.0021 HC 1.0000 SB 0.9982 SB 0.0016 HC 0.9294 SB 0.0510 HC 0.0195 E 0.8323 SB 0.1187 HC 0.0490 E

	HUHNE-5	0.7405 SB	0.2586 E	
	HUHNE-7	0.9931 SB	0.0062 E	
	HUHNI-1	0.9992 SB		
	HUHNI-2	0.6166 SB	0.2900 E	0.0934 HC
	HUHNI-4	0.9109 SB	0.0891 TB	
	HUHNI-5	0.9996 SB		
	HUHNI-7	0.0035 DB	0.0047 B	0.0015 E
	HUPQOY-1	0.9869 SB	0.0131 TB	
	HUPQOY-5	0.9489 SB	0.0401 E	0.0110 HC
	HUPQUE-2	0.5361 SB	0.4609 B	0.0012 E
	HUPQUE-10	0.5119 SB	0.4677 TB	0.0203 B
	<b>ROMOS</b>	<b>1.0000 SB</b>		
	IQUFOP	0.9989 SB	0.0010 HC	
	KEZFUR	0.9992 SB		
	MOYZUV	1.0000 SB		
	PÉGALE-1	0.8848 SB	0.1142 E	0.0010 HC
	PÉGALE-2	0.9975 SB	0.0023 E	
	<b>PEWLAE-1</b>	<b>1.0000 SB</b>		
	<b>PEWLAE-2</b>	<b>0.8848 SB</b>	<b>0.1142 E</b>	<b>0.0010 HC</b>
	QARTOT-1	0.9828 SB	0.0138 HC	0.0033 E
	QARTOT-2	0.9931 SB	0.0066 HC	
	QARTUZ-1	0.9796 SB	0.0195 HC	
	QARTUZ-2	0.9658 SB	0.0318 HC	0.0024 E
	QEQTUB	0.9671 SB	0.0234 HC	0.0095 E
	QEXQEQ-1	0.9998 SB		
	<b>SOLGIG</b>	<b>0.4209 SB</b>	<b>0.3748 HC</b>	<b>0.2044 E</b>
	<b>TULFIQ</b>	<b>0.9439 SB</b>	<b>0.0556 E</b>	
	<b>VUZBUO</b>	<b>1.0000 SB</b>		
	XEZFIR-1	0.9980 SB	0.0015 HC	
	XEZFIR-2	0.9989 SB		
	XEZFIR-5	0.7831 SB	0.2161 E	
	XEZFIR-7	0.0085 SB	0.0012 E	
	XEZFOX-2	0.5092 SB	0.3600 E	0.1308 HC
	XEZFOX-4	0.9995 SB		
	XEZFOX-7	0.6141 SB	0.3859 TB	
	XEZFOX-10	0.9722 SB	0.0183 HC	0.0095 E
	YEQHEI	0.9745 SB	0.0252 E	

## Paladio [3]

Conf.	Refcode	Área de Estadística		
C	VAGTEC	0.9764 C	0.0210 E	0.0025 HC
B	<b>BUHROM</b>	<b>1.0000 B</b>		
	<b>BUHSAZ</b>	<b>1.0000 B</b>		
	<b>BUHSED</b>	<b>0.9722 B</b>	<b>0.0233 TB</b>	<b>0.0045 SB</b>
	HENGEN	0.9686 B	0.0313 SB	
	INIWUX	0.8287 B	0.1660 SB	0.0053 E
	INIXAE	0.9982 B	0.0018 SB	
	JEVWUD	0.5720 B	0.3115 SB	0.1164 E
	KATFIV	0.9999 B		
	KEQPAY	0.8403 B	0.1574 SB	0.0022 TB
	LEGKAT	0.7657 B	0.2115 TB	0.0229 SB
	QAFMUG	1.0000 B		
QKEGIX	0.9968 B	0.0030 SB		
<b>XAHYAI-2</b>	<b>0.9882 B</b>	<b>0.0087 SB</b>	<b>0.0031 E</b>	
YAYZUT	0.9998 B			
E	EHUDUG	0.9760 E	0.0238 HC	
	<b>KAKDAD</b>	<b>1.0000 E</b>		
	<b>KUDTIN-1</b>	<b>1.0000 E</b>		
	<b>KUDTIN-2</b>	<b>0.9682 E</b>	<b>0.0318 HC</b>	
	<b>KUDTOT-1</b>	<b>1.0000 E</b>		
	<b>KUDTOT-2</b>	<b>1.0000 E</b>		
	<b>QACFIL</b>	<b>1.0000 E</b>		
VAGRUQ	0.9950 E	0.0050 HC		

SB	BUHRUS	0.9884 SB	0.0116 TB
	BUHSIH	1.0000 SB	
	IDULAV	0.8879 SB	0.0691 B 0.0430 E
	INIXEI-1	0.9090 SB	0.0848 E 0.0060 B
	INIXEI-2	0.7578 SB	0.1807 B 0.0614E
	QAFMOA	0.9677 SB	0.315 E
	RITLOV	0.9990 SB	
	XAHXOV	1.0000 SB	
	XAHXUB	0.9490 SB	0.0483 E 0.0016 B
	XAHYAI-1	0.9750 SB	0.0179 E 0.0071 B

## Platino [3]

Conf.	Refcode	Área de Estadística	
C	HIRYOW	1.000 C	
	NEBSOC	1.000 C	
B	AHEHIE	0.9964 B	0.0036 SB
	ALICON	1.000 B	
	AMCBPT	0.9996 B	
	BERBAL-2	0.9997 B	
	BUTJII	0.9899 B	0.0099 SB
	CAGDUJ	1.000 B	
	CUHKIZ	0.9997 B	
	DEGTED	0.96333 B	0.0364 SB
	GADZEQ	0.9996 B	
	GOZJEK	0.8810 B	0.1190 TB
	HAGPIP-1	1.000 B	
	HAGPIP-2	1.000 B	
	HISGUL	0.9964 B	0.0029 SB
	JAJZEA-1	0.7793 B	0.1904 TB 0.0303 SB
	JAJZEA-2	0.9859 B	0.0139 TB
	KANLOB	0.9866 B	0.0134 TB
	KEJJIS	1.000 B	
	LALNAN	0.9891 B	0.0069 TB 0.0040 SB
	LIYLUA-1	0.9965 B	0.0034 SB
	LIYLUA-2	0.9886 B	0.0111 SB
	LORCOK	0.9988 B	
	MILMID	0.9997 B	
	MLAMPT	1.0000 B	
	NAVBUI	0.9759 B	0.0189 SB 0.0052 TB
	NUCVEM	0.9736 B	0.0258 SB
	PEXTOB-1	1.0000 B	
	PEXTOB-2	1.0000 B	
	POJXOB	1.0000 B	
	QASKEB	0.9996 B	
	QUBFOI	0.9325 B	0.0648 SB 0.0027 E
	REJIIA	0.9994 B	
	TEVSAP	1.0000 B	
	TINSEP	0.6632 B	0.3323 TB 0.0045 SB
	UJETAF	1.0000 B	
	VAYXEY	0.5182 B	0.4694 SB 0.0125 TB
	WIGMEE	0.9999 B	
	WUCLEL	1.0000 B	
	XIBRAC	0.8379 B	0.1612 SB
	XILRIU	1.0000 B	
	XOFQUF	1.0000 B	
	XUNBOX	0.9998 B	
ZASVOE	0.9846 B	0.0142 SB 0.0012 E	
ZURLAZ-1	0.9999 B		
ZURLAZ-2	0.9999 B		
ZURLED-1	0.9993 B		
ZURLED-2	0.9998 B		
ZUZTIX	1.0000 B		



TB	BERBAL-1	0.9913 TB	0.0069 B	0.0018 SB
	KASROL	0.9932 TB	0.0037 B	0.0031 SB
	WAWVOF	0.7588 TB	0.2787 SB	0.0024 B
E	HUQJUY	0.8692 E	0.1301 SB	
	NUMCUT	0.9330 E	0.0669 HC	
	TUZYES	0.9359 E	0.0347 HC	0.0295 SB
	WUCLIP	0.8941 E	0.1051 SB	
SB	WUCLOV-2	0.7410 E	0.2583 SB	
	BIPWIG	0.9959 SB	0.0040 E	
	DIC TOY	0.7918 SB	0.1313 E	0.0768 E
	HABZIU	0.9979 SB	0.0015 E	
	HAGHED	0.7574 SB	0.2410 E	0.0016 HC
	HOVTAN	0.9291 SB	0.0682 B	0.0025 TB
	HUQKAF	0.9660 SB	0.0315 E	0.0023 B
	IPIHEU	0.8289 SB	0.1664 B	0.0044 TB
	JAJZIE	0.7470 SB	0.2514 E	0.0016 HC
	KARZUY	0.9881 SB	0.0079 E	0.0040 B
	MAWGAS	0.8359 SB	0.1632 E	
	NUCVIQ	0.4953 SB	0.3758 B	0.1288 E
	PEJPEZ	0.9993 SB		
	PERYEQ	0.5187 SB	0.4795 E	0.0015 B
	POB	0.9957 SB	0.0027 HC	0.0016 E
	QAS	0.6338 SB	0.2199 E	0.1463 HC
	QASKUR	0.9990 SB		
	QENBIV-1	0.9997 SB		
	QENBIV-2	0.9889 SB	0.0101 HC	0.0011 E
	TUZYAO	0.9678 SB	0.0321 TB	
	VEKFUN	0.9053 SB	0.0880 E	0.0065 B
	VONLUF	0.6914 SB	0.2159 E	0.0926 E
	VONTOH	0.9521 SB	0.0247 E	0.0231 B
	VONTUN	0.9459 SB	0.0296 HC	0.0245 E
	VORGUE	1.0000 SB		
	WODCIB	0.9944 SB	0.0048 B	
	WUCLOV-1	0.9988 SB	0.0010 E	
	XIGBAQ	0.8666 SB	0.1148 B	0.0149 E
	XIGBEU	0.9992 SB		
	YAHBAS	0.9134 SB	0.0581 B	0.0285 TB
YUKMEX	0.5590 SB	0.4360 B	0.0048 E	
ZAQWOD-1	0.5595 SB	0.4396 E		
ZAQWOD-2	0.9564 SB	0.0421 B	0.0014 E	
ZUTHIF	0.6133 SB	0.3846 E	0.0022 HC	
ZUTHOL	0.9855 SB	0.0136 E		

## Níquel [4]

Conf.	Refcode	Área de Estadística
C	BTZDNI	1.0000 C
	BUKZAI	1.0000 C
	CARSET	1.0000 C
	CIJYID-2	1.0000 C
	DOYDOK-2	1.0000 C
	GEGYOG-2	0.9952 C 0.0037 E 0.0011 HC
	HBTDNI	1.0000 C
	KIBBIH-2	1.0000 C
	KIGXED	1.0000 C
	KURLIS-1	1.0000 C
	KUZREA	1.0000 C
	LAZVUE-1	1.0000 C
	LAZVUE-2	1.0000 C
	LAZWUF-2	1.0000 C
	MAXSIN-1	1.0000 C
	MAXSIN-2	1.0000 C
	MAXSOT	1.0000 C
	MAXSUC	1.0000 C
	MAXTAG-1	1.0000 C

	MAXTAG-2	1.0000 C	
	MAXTEK-1	1.0000 C	
	MAXTEK-2	1.0000 C	
	NEYBAU-1	1.0000 C	
	NEYBAU-2	1.0000 C	
	PASGEV	1.0000 C	
	PHDTNI10	1.0000 C	
	PINBET	1.0000 C	
	PITVIX-1	1.0000 C	
	PITVIX-2	1.0000 C	
	PITVUJ-2	1.0000 C	
	PITVUJ-3	1.0000 C	
	PITVUJ-5	1.0000 C	
	PITVUJ-7	1.0000 C	
	PTNNIB10	1.0000 C	
	REGWEF-1	1.0000 C	
	REGWEF-2	1.0000 C	
	ROPXID	1.0000 C	
	ROQSIZ-1	1.0000 C	
	ROQSIZ-4	1.0000 C	
	SUGVEV-1	1.0000 C	
	SUGVEV-2	1.0000 C	
	SUGVOF-1	1.0000 C	
	SUGVOF-2	1.0000 C	
	SUGWAS-1	1.0000 C	
	SUGWAS-2	1.0000 C	
	TEQLIK	1.0000 C	
	TETGEE	1.0000 C	
	TTCJNI	1.0000 C	
	UJUZAA-1	1.0000 C	
	UJUZAA-2	1.0000 C	
	UJUZAA-3	1.0000 C	
	VIMYEW	1.0000 C	
	WEBSUR-1	1.0000 C	
	WEBSUR-2	1.0000 C	
	WEMCUM	1.0000 C	
	WESHIM-2	1.0000 C	
	XISKEP	1.0000 C	
	YIZSOP-4	1.0000 C	
	ZICSIN-1	1.0000 C	
	ZICSIN-2	1.0000 C	
B	ALALOO	1.0000 B	
	CIYID-1	1.0000 B	
	KIBBIH-1	0.9997 B	
	LAZWEP	1.0000 B	
	LAZWOZ	1.0000 B	
	LAZWUF-1	1.0000 B	
	LECCOM	1.0000 B	
	SUQQIF	1.0000 B	
	SUQQOL	1.0000 B	
	QAPTOR	1.0000 B	
	QAPTUX-1	1.0000 B	
	QAPTUX-2	1.0000 B	
	QUCBEW	1.0000 B	
	TETGAA	1.0000 B	
	WESHIM-1	1.0000 B	
	YIZSOP-3	1.0000 B	
TB	BAWMES	1.0000 TB	
	DOYDOK-1	1.0000 TB	
	DUZZUT-1	1.0000 TB	
	DUZZUT-2	1.0000 TB	
	DUZZUT-3	1.0000 TB	
	GEGYOG-3	0.9938 TB	0.0062 SB
	KURLIS-2	1.0000 TB	
	LAZXAM	1.0000 TB	
	LEFJUB	1.0000 TB	
	PITVUJ-1	1.0000 TB	
	PITVUJ-4	1.0000 TB	
	PITVUJ-6	1.0000 TB	
	PITVUJ-8	1.0000 TB	
	QARDAO	1.0000 TB	
	ROQSIZ-2	0.9997 TB	
	ROQSIZ-3	0.9434 TB	0.0566 SB
	VUDDON	1.0000 TB	

	YOYS10-1 YOYS10-2 YOYS10-3 YOYS10-4 YOYS10-5 YOYS10-6	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB
E	DAFBAO DAFBES DOYDOK-3 FIBCOJ GEGYOG-1 PAHGEK-1 PAHGEK-2 PAHG10 TACTOG WAXDII-1 WAXDOO-1 YIZSOP-1 YIZSOP-2 XICSOT	0.9431 E 0.0568 HC 0.9963 E 0.037 HC 0.9163 E 0.0735 HC 0.0102 SB 0.8073 E 0.1927 HC 0.8697 E 0.1302 HC 0.8804 E 0.1196 HC 0.6274 E 0.3726 HC 0.6887 E 0.3113 HC 0.8827 E 0.1173 HC 0.8130 E 0.1278 SB 0.0593 HC 0.9710 E 0.0290 HC 0.8580 E 0.1415 SB 0.9984 E 0.0015 SB 0.3996 E 0.3745 SB 0.2260 HC
HC	JOGTOO LALCAC QADHUY SOZMEZ WAXDII-2 WAXDOO-2 WESHEI	0.8833 HC 0.1123 E 0.0044 SB 0.9685 HC 0.0315 E 0.8555 HC 0.1281 SB 0.0164 E 0.9422 HC 0.0578 E 0.8666 HC 0.1208 E 0.0126 SB 0.8778 HC 0.1211 E 0.0011 SB 0.9435 HC 0.0541 E 0.0024 SB

#### Paladio [4]

Conf.	Refcode	Área de Estadística
	BANMIN-2	1.0000 C
	FAJREN	1.0000 C
	FAJRIR	1.0000 C
	FAJRUD-1	1.0000 C
	FAJRUD-2	1.0000 C
	FAJSAK-1	1.0000 C
	FAJSAK-2	1.0000 C
	FIYFIC-1	1.0000 C
	FIYFIC-2	1.0000 C
	IWALAT-1	0.9988 C
	IWALAT-2	0.9956 C 0.0031 E 0.0013 HC
	IWALAT-3	1.0000 C
	IWALAT-4	1.0000 C
	KEXYIW-1	1.0000 C
	KEXYIW-2	1.0000 C
	KULNEK-1	1.0000 C
	KULNEK-2	1.0000 C
	MESFAR-1	1.0000 C
	MESFAR-2	1.0000 C
	MESFEV	1.0000 C
	MESFIZ-1	1.0000 C
	NIDQUM	1.0000 C
	NIZQOC	1.0000 C
	NIFQUI-1	1.0000 C
	NIFQUI-2	1.0000 C
	NIZRAP-1	1.0000 C
	NIZRAP-2	1.0000 C
	NIZRET	1.0000 C
	POBQOM-1	1.0000 C
	POBQOM-2	1.0000 C
	QADYEZ-1	1.0000 C
	QADYEZ-2	1.0000 C
	QOCCOA-2	1.0000 C
	QOCDAN-1	1.0000 C
	ROCPPEE	1.0000 C
	TATKIJ-1	1.0000 C

	TATKIJ-2 TOFNIL TOGHOMO1-1 TOGHOMO1-2 TOGHOMO1-3 TOGHOMO1-4 UHANUM-1 UHANUM-2 VIVXUT-1 VIVYAA-1	1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C
B	BANMIN-1 ECAREF-1 ECAREF-2 QADYID-1 QADYID-2 QOCCOA-1 QOCDAN-2 VIVXUT-2 VIVYAA-2	1.0000 B 0.9998 B 0.9970 B 0.0028 SB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B
TB	IYUZUX FUDROM DUDRUS MESFIZ-2 TATKEF-1 TATKEF-2 TATKOP TEKZUE KORSIT LAJYEB-1 LAJYEB-2 QOCCOA-3 QOCCOA-4 ZUHCOU	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9956 TB 0.0044 B 0.9397 TB 0.0603 B 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9969 E 0.0031 HC 0.9943 E 0.0057 HC 0.9600 E 0.0400 HC 0.4469 E 0.2863 HC 0.2669 C 0.6444 E 0.2196 B 0.1359 SB 0.9981 E 0.0019 HC
E	KORSIT LAJYEB-1 LAJYEB-2 RIZQIB SOQFUA QOCCOA-3 QOCCOA-4 ZUHCOU	0.9969 E 0.0031 HC 0.9943 E 0.0057 HC 0.9600 E 0.0400 HC 0.8782 E 0.1218 HC 0.7976 E 0.2024 HC 0.4469 E 0.2863 HC 0.2669 C 0.6444 E 0.2196 B 0.1359 SB 0.9981 E 0.0019 HC
SB	PAKBOS	0.6387 SB 0.3613 TB

**Platino [4]**

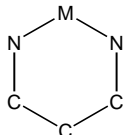
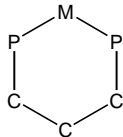
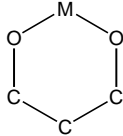
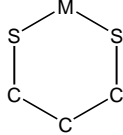
Conf.	Refcode	Área de Estadística
C	GOTFAW-1	1.0000 C
	GOTFAW-2	1.0000 C
	IWALEX-1	1.0000 C
	IWALEX-2	1.0000 C
	MUDJEA	1.0000 C
	NUGCAT	1.0000 C
	PONLUC	1.0000 C
	SODPUW-1	1.0000 C
	SODPUW-2	1.0000 C
	SODRAE-2	1.0000 C
	SONNOY-1	1.0000 C
	SONNOY-2	1.0000 C
	TOFNOR	1.0000 C
	TOFREL-2	1.0000 C
	TOGHIG-1	1.0000 C
	TOGHIG-2	1.0000 C
	TOGHIG-3	1.0000 C
	TOGHIG-4	1.0000 C
	TOQJEU-1	1.0000 C
	TOQJIS-2	1.0000 C

	TOQJOY-1 WECRIF-1 WECRIF-2 WECRIF-3 XOTSUU ZOCWIX	1.0000 C 0.9999 C 1.0000 C 0.9958 C 0.0023 E 0.0019 HC 1.0000 C 1.0000 C
B	ALALOO WUDGUY	1.0000 B 0.8545 B 0.1455 TB
TB	DEYLID ALUWAG ALUWIO IPOQAG-2 VITLEQ WUDHAF WUDHIN-1 WUDHIN-2	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB
E	FATGEN IPOQAG-1 IPOQEK NUMWIB QUQMUE TOFREL-1 TOQJED-2 TOQJIS-1 TOQJOY-2 WUDTIY	0.9784 E 0.0216 HC 1.0000 E 0.9454 E 0.0545 HC 0.9996 E 0.8889 E 0.1109 HC 0.7913 E 0.2084 HC 0.6991 E 0.2667 SB 0.0342 HC 0.7349 E 0.2417 HC 0.0235 C 0.9797 E 0.0170 HC 0.0033 SB 0.9966 E 0.0034 HC
HC	GIBGED SODRAE-1	0.9486 HC 0.0356 E 0.0158 SB 0.5949 HC 0.2055 E 0.1996 C
SB	XAGKOH	1.0000 SB

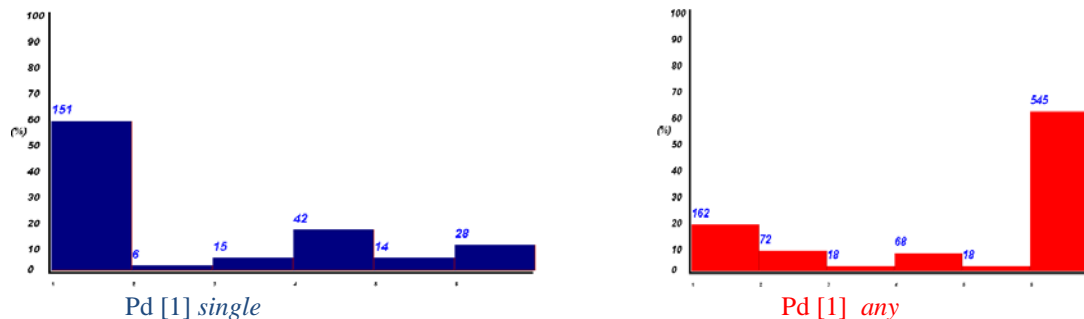
### III.2.- ESTUDIO DE LAS ESTRUCTURAS OBTENIDAS CON LA CONDICIÓN DE BÚSQUEDA ANY

Dados los pocos cambios producidos en las conformaciones obtenidas pese al sustancial aumento en el número de fragmentos (32%) vamos a introducir una novedad en este Proyecto Fin de Estudios consistente en comparar las conformaciones de los fragmentos estudiados hasta ahora (obtenidos en la búsqueda de conformaciones en las que los enlaces en los anillos son simples, (*single*) con las de los obtenidos cuando la citada búsqueda se hace sin cortapisas, (*any*). Suponemos que aumentará considerablemente el número de fragmentos obtenidos y, probablemente, variará el porcentaje de conformaciones. No estudiamos el caso del níquel [1].

Los resultados obtenidos son:

Compuestos Datos disponibles <b>Datos (depurados)</b> Fragmentos <b>Fragmentos (depurados)</b>						
	níquel		paladio		platino	
			166	489	137	287
			154		115	
			<b>108</b>	<b>457</b>	<b>109</b>	<b>251</b>
			268		161	
			<b>256</b>	<b>883</b>	<b>152</b>	<b>409</b>
	126	135	211	256	204	219
	116		206		189	
	<b>110</b>	<b>124</b>	<b>201</b>	<b>247</b>	<b>184</b>	<b>204</b>
	233		277		271	
	<b>220</b>	<b>246</b>	<b>271</b>	<b>323</b>	<b>264</b>	<b>286</b>
	101	677	29	230	104	252
	92		29		86	
	<b>87</b>	<b>620</b>	<b>29</b>	<b>215</b>	<b>81</b>	<b>221</b>
	188		33		97	
	<b>181</b>	<b>1125</b>	<b>33</b>	<b>285</b>	<b>91</b>	<b>278</b>
	86	100	45	48	42	61
	73		41		36	
	<b>72</b>	<b>86</b>	<b>41</b>	<b>44</b>	<b>33</b>	<b>55</b>
	123		42		57	
	<b>120</b>	<b>141</b>	<b>72</b>	<b>76</b>	<b>49</b>	<b>83</b>
Total	<b>521</b>	<b>1512</b>	<b>632</b>	<b>1567</b>	<b>556</b>	<b>1056</b>

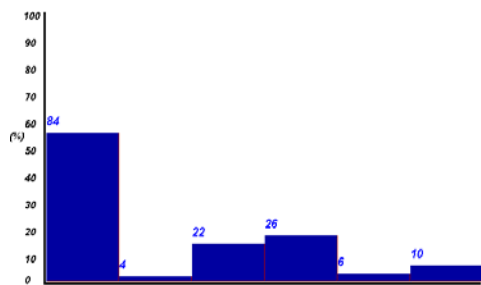
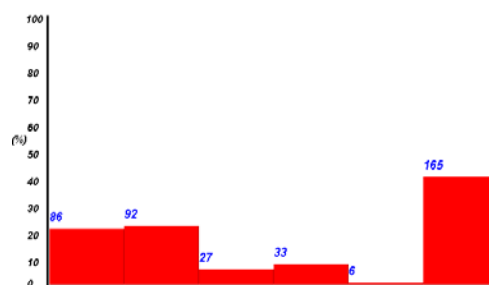
## Fragmentos de paladio [1]



Conformaciones Pd [1] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	151 58.98%	162 18.32%
<i>boat</i> (B)	6 2.34%	72 8.15%
<i>twist-boat</i> (TB)	15 5.86%	18 2.03%
<i>envelope</i> (E)	42 16.41%	68 7.71%
<i>half-chair</i> (HC)	14 5.47%	18 2.04%
<i>screw-boat</i> (SB)	28 10.94%	545 61.72%
Fragmentos totales	256	883

Los cambios son evidentes. Visualmente, los histogramas son muy diferentes. Los aumentos más importantes se dan en la *screw boat* que pasa del 11% al 62% y la *boat*, del 2% al 8%. El número de fragmentos ha crecido desde 256 hasta 883 (3.5 veces) y, mientras que la variación de las restantes conformaciones ha sido desde 1.1 veces para la *chair* hasta 1.6 veces para la *envelope*, la *boat* ha aumentado 12 veces y la *screw boat* 19.5 veces.

### Fragmentos de platino [1]

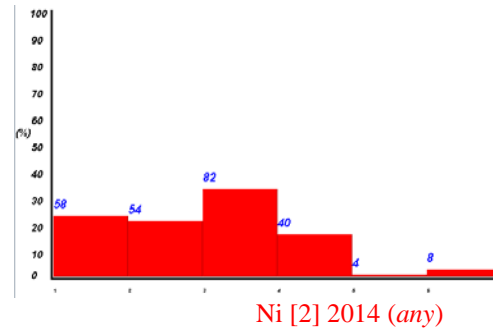
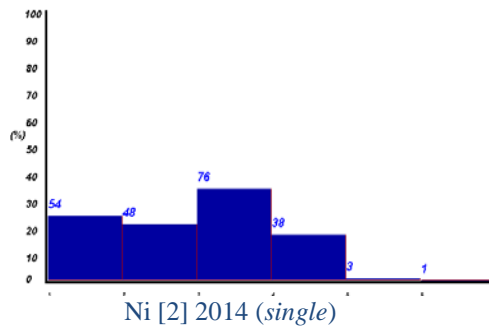
Pt [1] 2014 (*single*)Pt [1] 2014 (*any*)

Conformaciones Pt [1] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	84 55.26%	86 21.03%
<i>boat</i> (B)	4 2.63%	92 22.49%
<i>twist-boat</i> (TB)	22 14.47%	27 6.60%
<i>envelope</i> (E)	26 17.11%	33 8.07%
<i>half-chair</i> (HC)	6 3.95%	6 1.47%
<i>screw-boat</i> (SB)	10 6.58%	165 40.34%
Fragmentos totales	152	409

Los cambios son evidentes, lo que se refleja en que los histogramas son muy diferentes. Los aumentos más importantes se dan en la *screw boat* que pasa del 6.5% al 40.3% y la *boat*, del 2.6% al 22.5%. El número de fragmentos ha crecido desde 152 hasta 409 (2.7 veces) y, mientras que la variación de las restantes conformaciones ha sido desde 1.0 veces para la *half chair* (no hay ninguna nueva) hasta 1.3 veces para la *envelope*, la *screw boat* ha aumentado 16.5 veces y la *boat* 23 veces.



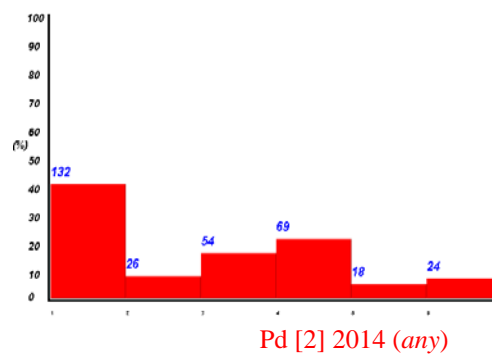
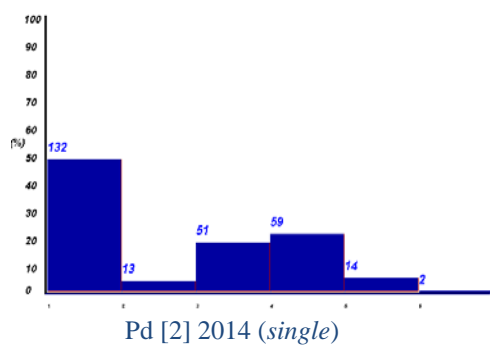
### Fragmentos de níquel [2]



Conformaciones Ni [2] y %	single	any
<i>chair</i> (C)	54 24.55%	58 23%
<i>boat</i> (B)	48 21.82%	54 21%
<i>twist-boat</i> (TB)	76 34.55%	82 33.33%
<i>envelope</i> (E)	38 17.27%	40 16.23%
<i>half-chair</i> (HC)	3 1.36%	4 1.62%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 0.45%	8 3.25%
Fragmentos totales	220	246

Los histogramas son muy parecidos ya que apenas hay variaciones. Solo hay cambios en la *screw boat* que pasa del 0.5% al 3.3%. El número de fragmentos ha crecido desde 220 hasta 246 (1.1 veces).

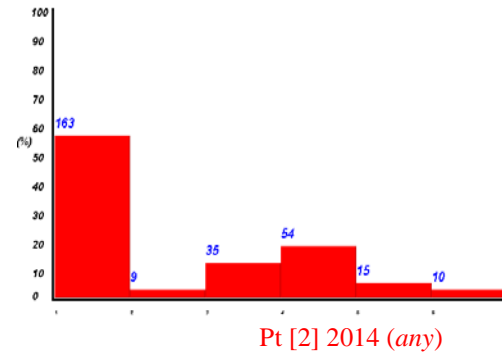
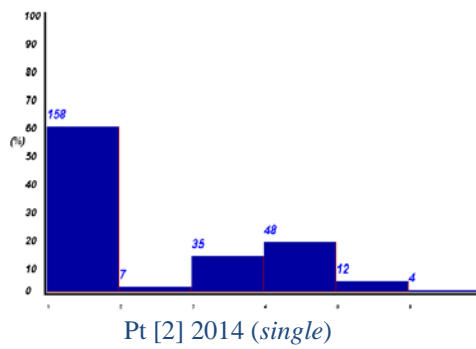
### Fragmentos de paladio [2]



Conformaciones Pd [2] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	132 48.71%	132 40.87%
<i>boat</i> (B)	13 4.86%	26 8.05%
<i>twist-boat</i> (TB)	51 18.82%	54 16.72%
<i>envelope</i> (E)	59 21.77%	69 21.36%
<i>half-chair</i> (HC)	14 5.17%	18 5.57%
<i>screw-boat</i> (SB)	2 0.74%	24 7.43%
Fragmentos totales	271	323

Hay cambios significativos. En los histogramas se aprecia el crecimiento en la *boat* (del 5% al 8%) y, sobre todo, en la *screw boat* (del 1% al 7%). También se observa un descenso de un 8% en la *chair*, cuyo número no ha variado mientras que el total de fragmentos ha crecido 1.2 veces.

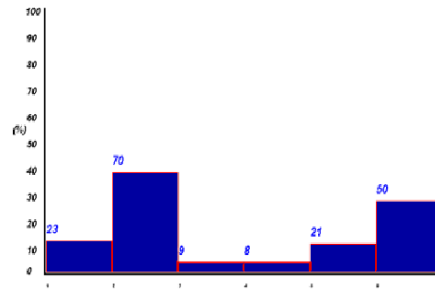
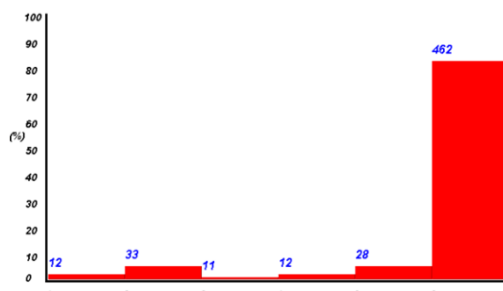
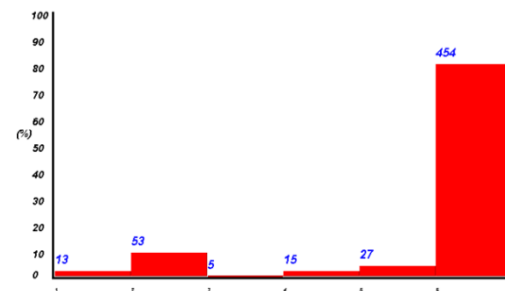
## Fragmentos de platino [2]



Conformaciones Pd [2] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	158 59.85%	163 56.99%
<i>boat</i> (B)	7 2.65%	9 3.14%
<i>twist-boat</i> (TB)	35 13.26%	35 12.24%
<i>envelope</i> (E)	48 18.18%	54 18.88%
<i>half-chair</i> (HC)	12 4.55%	15 5.24%
<i>screw-boat</i> (SB)	4 1.51%	10 3.50%
Fragmentos totales	264	286

Los cambios son poco significativos siendo los histogramas muy similares. No obstante, se observa un leve crecimiento en los pocos fragmentos de *screw boat*, cuyo número se duplica.

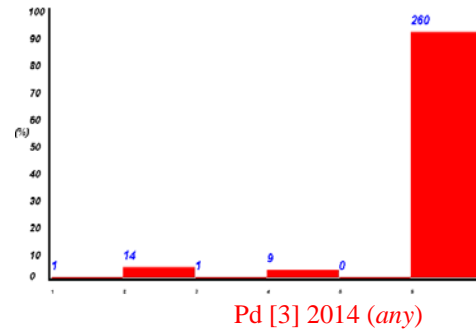
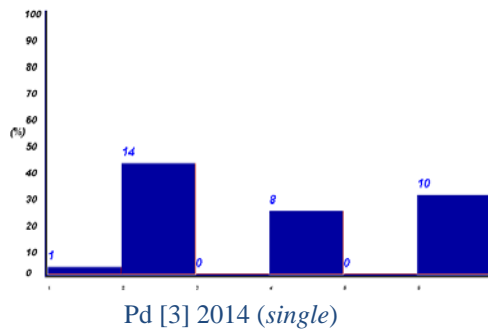
### Fragmentos de níquel [3]

Ni [3] 2014 (*single*)Ni [3] A 2014 (*any*)Ni [3] B 2014 (*any*)

Conformaciones Ni [3] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	23 12.70%	25 2.22%
<i>boat</i> (B)	70 38.67%	86 7.64%
<i>twist-boat</i> (TB)	9 4.97%	16 1.42%
<i>envelope</i> (E)	8 4.42%	27 2.40%
<i>half-chair</i> (HC)	21 11.60%	55 4.89%
<i>screw-boat</i> (SB)	50 27.62%	916 81.42%
Fragmentos totales	181	1125

Los cambios son evidentes. Los histogramas son muy diferentes. El aumento más importante se da en la *screw boat* que pasa del 27.6% al 81.4%. También se observan descensos significativos en las conformaciones *boat*, del 38.6% al 7.6% y en la *half-chair*, del 11.6% al 4.9%. El número de fragmentos ha crecido enormemente, desde 181 hasta 1125 (6.2 veces). En las restantes conformaciones hay subidas de 1.2 veces para la *boat* y de 3.3 veces para la *envelope*.

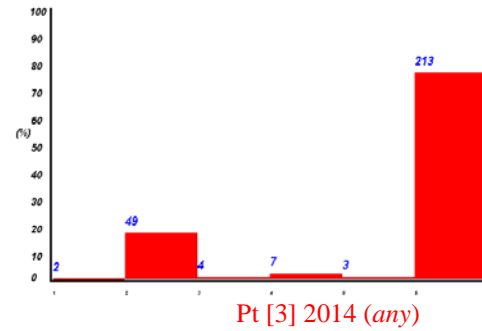
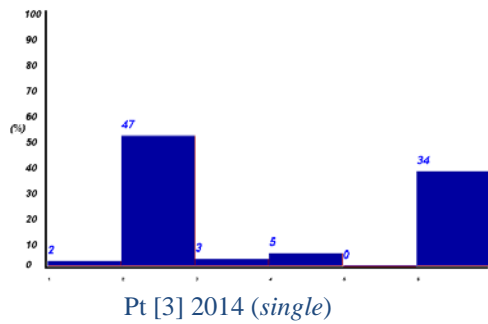
### Fragmentos de paladio [3]



Conformaciones <b>Pd [3]</b> y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	1 3.03%	1 0.35%
<i>boat</i> (B)	14 42.42%	14 4.91%
<i>twist-boat</i> (TB)	0 0%	1 0.35%
<i>envelope</i> (E)	8 24.24%	9 3.15%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0%	0 0.00%
<i>screw-boat</i> (SB)	10 30.30%	260 91.23%
Fragmentos totales	33	285

Visualmente, los histogramas son muy diferentes. Sin embargo solo hay un cambio, dramático, en los fragmentos de *screw boat* que aumentan 26 veces (de 10 a 260), en un porcentaje que crece desde el 30.3% al 91.2%. En el resto de conformaciones las variaciones son mínimas. Sigue sin haber fragmentos de la conformación *half-chair*.

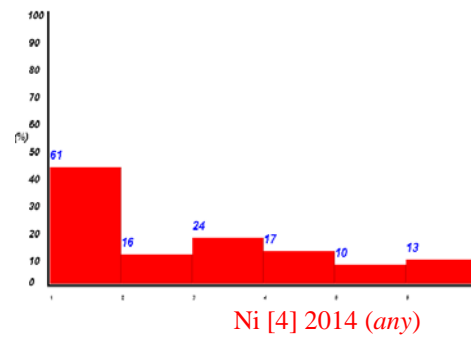
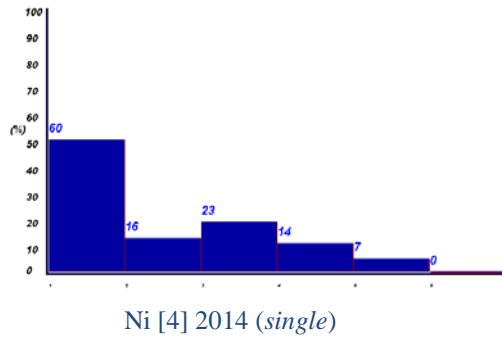
### Fragmentos de platino [3]



Conformaciones <b>Pt [3]</b> y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	2 2.20%	2 0.72%
<i>boat</i> (B)	47 51.65%	49 17.63%
<i>twist-boat</i> (TB)	3 3.29%	4 1.44%
<i>envelope</i> (E)	5 5.49%	7 2.52%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0%	3 1.08%
<i>screw-boat</i> (SB)	34 37.36%	213 76.62%
Fragmentos totales	91	278

Este caso es similar al anterior: gran crecimiento de la conformación *screw boat* en detrimento de las demás, que apenas varían.

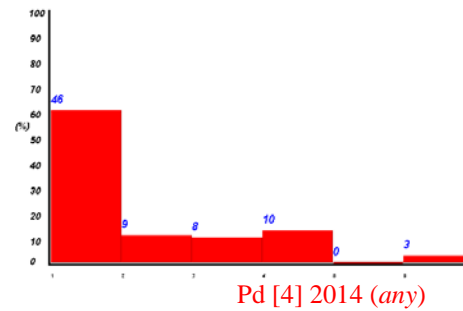
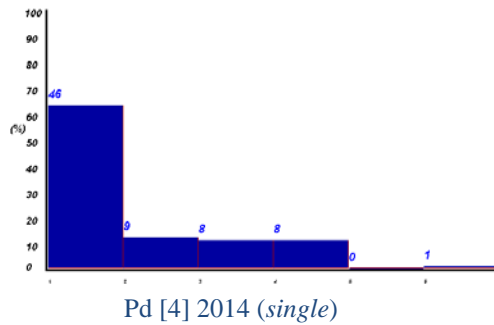
## Fragmentos de níquel [4]



Conformaciones Ni [4] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	60 50.00%	61 43.26%
<i>boat</i> (B)	16 13.13%	16 11.35%
<i>twist-boat</i> (TB)	23 19.17%	24 17.02%
<i>envelope</i> (E)	14 11.67%	17 12.05%
<i>half-chair</i> (HC)	7 5.83%	10 7.09%
<i>screw-boat</i> (SB)	0 0.00%	13 9.22%
Fragmentos totales	120	141

Este caso es similar a los dos anteriores: solo crece el número de los fragmentos de *screw boat*, aunque en este caso es un crecimiento moderado (0 a 13 fragmentos; 0% a 9%). Visualmente, los histogramas son similares observándose el crecimiento de la *screw boat* (a la derecha del histograma).

### Fragmentos de paladio [4]

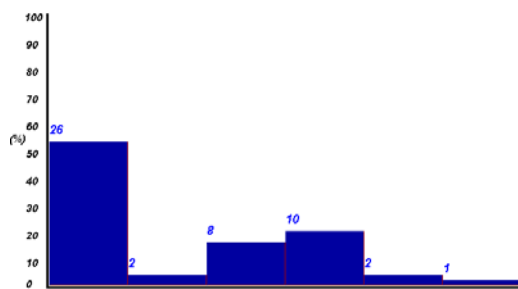
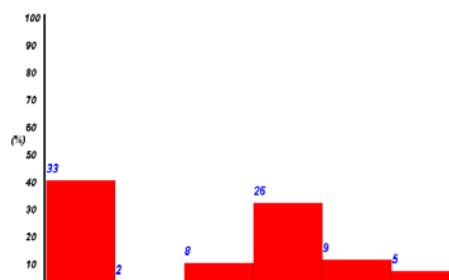


Conformaciones Pd [4] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	46 63.88%	46 60.52%
<i>boat</i> (B)	9 12.5%	9 11.84%
<i>twist-boat</i> (TB)	8 11.11%	8 10.52%
<i>envelope</i> (E)	8 11.11%	10 13.88%
<i>half-chair</i> (HC)	0 0.00%	0 0.00%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 1.38%	3 3.95%
Fragmentos totales	72	76

No hay cambios significativos. Aparecen 2 fragmentos más de *envelope* y otros 2 de *screw boat*. Estos leves cambios son apreciables visualmente en los histogramas dado el bajo número de datos.



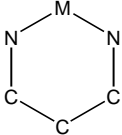
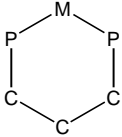
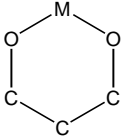
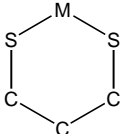
## Fragmentos de platino [4]

Pt [4] 2014 (*single*)Pt [4] 2014 (*any*)

Conformaciones Pt [4] y %	<i>single</i>	<i>any</i>
<i>chair</i> (C)	26 53.01%	33 39.76%
<i>boat</i> (B)	2 4.08%	2 2.40%
<i>twist-boat</i> (TB)	8 16.33%	8 9.64%
<i>envelope</i> (E)	10 20.41%	26 31.32%
<i>half-chair</i> (HC)	2 4.08%	9 10.84%
<i>screw-boat</i> (SB)	1 2.04%	5 6.02%
Fragmentos totales	49	83

Visualmente, los histogramas son similares pero con algunos cambios importantes. Los aumentos más significativos se dan en la *envelope* que aumenta del 20.4% al 31.3% y la *chair*, que desciende del 53% al 39.8%. El número de fragmentos ha crecido desde 49 hasta 83 (1.7 veces). La conformación *half-chair* ha aumentado 4.5 veces y la *screw-boat* 5 veces pero para un pequeño número de fragmentos, por lo que no es muy significativo.

En la tabla siguiente se resume el aumento y variación habidos, en porcentaje, de los fragmentos de los distintos casos estudiados:

	Aumento de fragmentos estudiados (%) y variación		
	níquel	paladio	platino
		Cambios evidentes SB ↑↑ B↑	Cambios evidentes SB ↑↑ B↑
	sin cambios SB ↑	El mismo nº de C B ↑ SB ↑	Sin cambios SB ↑
	Grandes cambios SB ↑↑ B ↑ E ↑	Grandes cambios SB ↑↑	Grandes cambios SB ↑↑
	Sin cambios SB ↑	Sin cambios	Sin cambios HC ↑ SB ↑

El número de fragmentos ha crecido desde los 1709 de la búsqueda *single* hasta los 4135 de la búsqueda *any*. Los aumentos más importantes se dan en:

- Pd [1] 256 → 883
- Pt [1] 152 → 409
- Ni [3] 181 → 1025
- Pd [3] 33 → 285
- Pt [3] 91 → 278
- Pt [4] 49 → 83

La mayor variación se ha dado en la conformación *screw boat*, cuyo número de fragmentos ha aumentado desde 141 (8.25%) a 2162 (52.29%). En la tabla siguiente se recoge la variación de los fragmentos *screw boat* para los distintos casos estudiados:

	níquel	paladio	platino
[1]		28 545	10 165
[2]	1 8	2 24	4 10
[3]	50 916	10 260	34 213
[4]	0 13	1 3	1 5
total	51 937	41 832	49 393

Para intentar comprender qué ha pasado, vamos a estudiar todos los fragmentos de *screw boat* para los compuestos de níquel, paladio y platino del tipo [4], el menos numeroso.

Como acabamos de ver en la tabla, el número de fragmentos *screw boat* ha crecido de la siguiente forma:

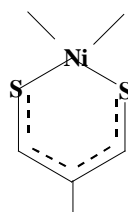
- Ni [4] 0 → 13
- Pd [4] 1 → 3
- Pt [4] 1 → 5.

Los *refcode* correspondientes a estos fragmentos y la probabilidad calculada según el Método de clasificación son:

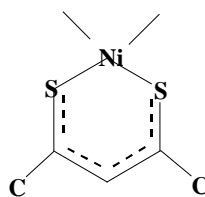
#### Ni [4]

COGWIE → SB 1.0000  
 CPSENI → SB 1.0000  
 DANPAJ → SB 1.0000  
 DASMIT → **SB 0.9834 HC 0.0166**  
 DSACNI → **SB 0.9715 HC 0.0263 E 0.0022**  
 GEDSIR → **SB 0.5693 E 0.2843 HC 0.1464**  
 GUHJUO → SB 1.0000  
 GUHKAV → SB 1.0000  
 GUHKEZ → SB 1.0000  
 KEJFUA → SB 1.0000  
 KUNCEB → SB 1.0000  
 PCNTNI → **SB 0.4732 E 0.4473 HC 0.0794**  
 VARWOA → SB 1.0000.

Casi todas las estructuras son planas ya que presentan dobles enlaces conjugados en el anillo. Como ejemplo presentamos el diagrama de los dos primeros fragmentos:



COGWIE

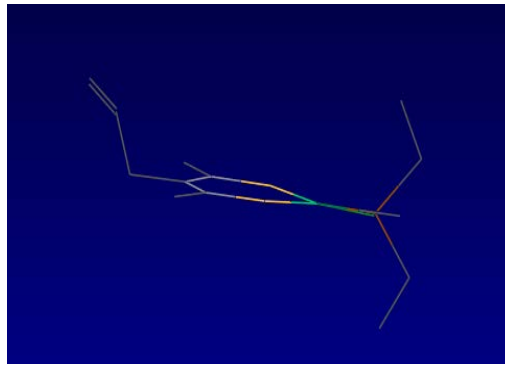


CPSENI

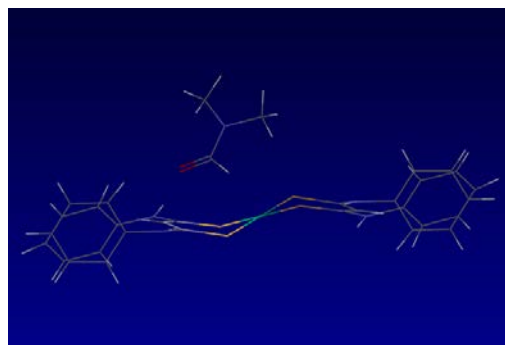
Las excepciones a la planaridad se dan en los fragmentos de *refcode* GEDSIR y PCNTNI, que son, precisamente, aquellos en los que la probabilidad difiere mucho del valor máximo 1.0000. Esto permite sugerir que cuando aparece probabilidad significati-

va para otras conformaciones (*envelope* y *half chair*, en este caso) disminuye la planaridad.

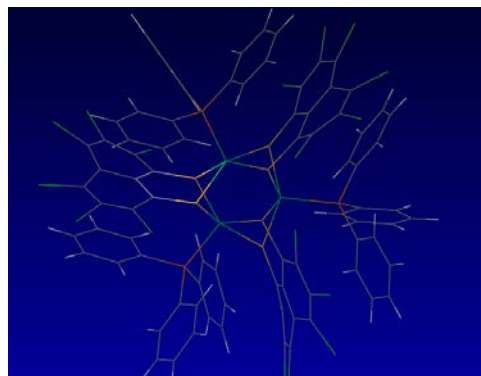
Con el fin de visualizar esta conclusión, en las figuras siguientes se presentan las estructuras del primer fragmento de Ni [4] (*refcode* COGWIE), plano, y las tridimensionales de otros dos fragmentos:



COGWIE



GEDSIR



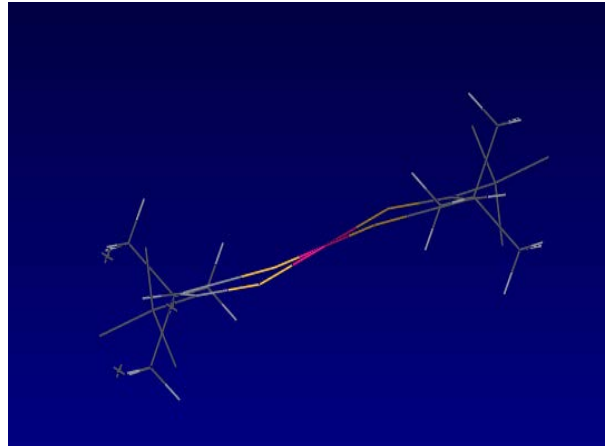
PCNTNI

Vamos a repetir el proceso para los fragmentos de Pd [4]

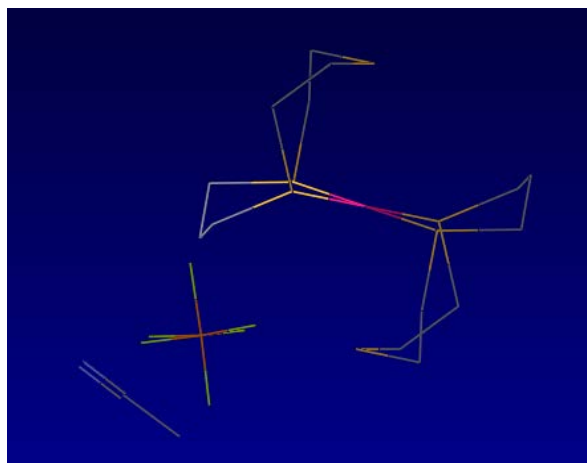
ABUTUN → SB 1.0000

PAKBOS → SB 0.6387 TB 0.3613

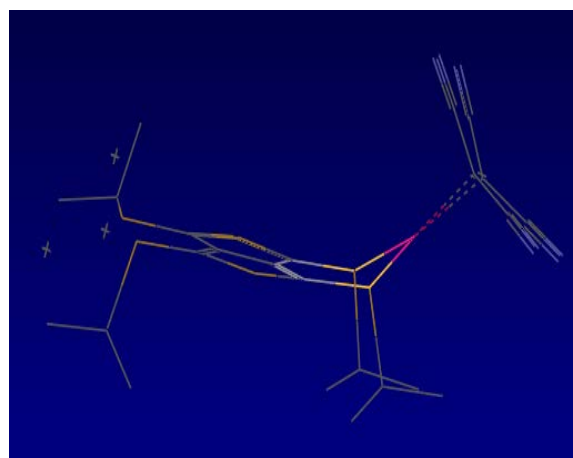
ZOYROU → SB 0.6171 HC 0.2341 E 0.1488



ABUTUN



PAKBOS



ZOYROU

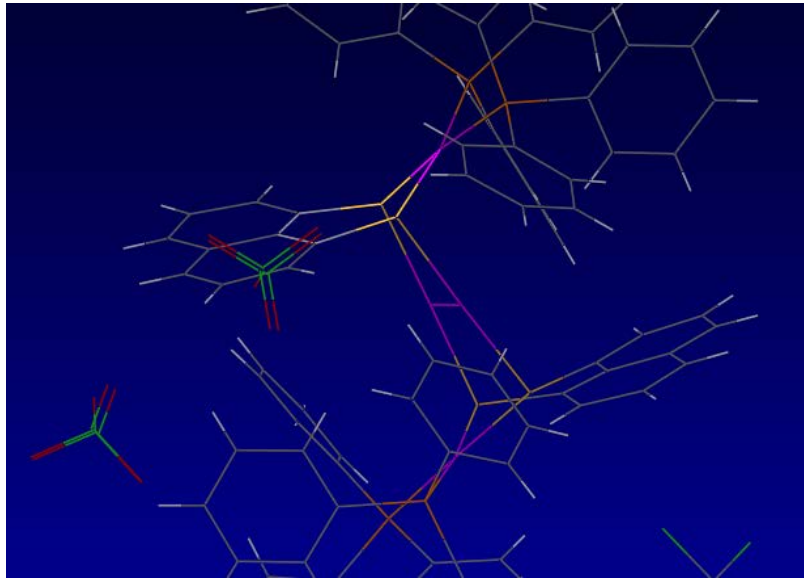
Por último, haremos los mismo para el caso del Pt [4]

CEWPIE → **SB 0.6782 HC 0.2783 E 0.0435**

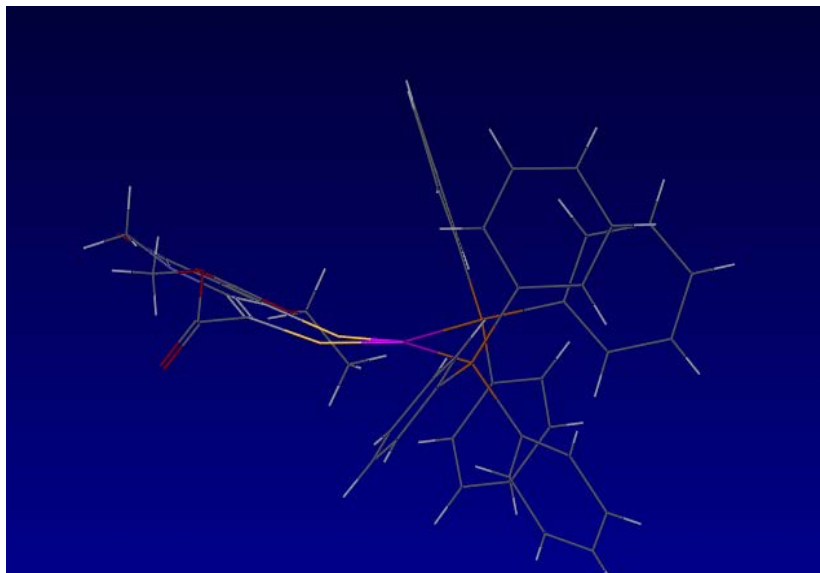
IJEHIO → SB 1.0000

PRTTCQ → SB 1.0000

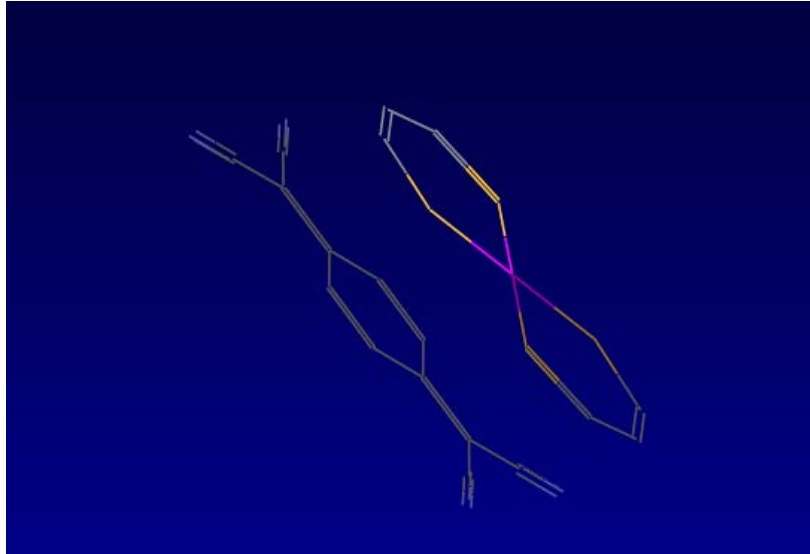
XAGKOH → SB 1.0000



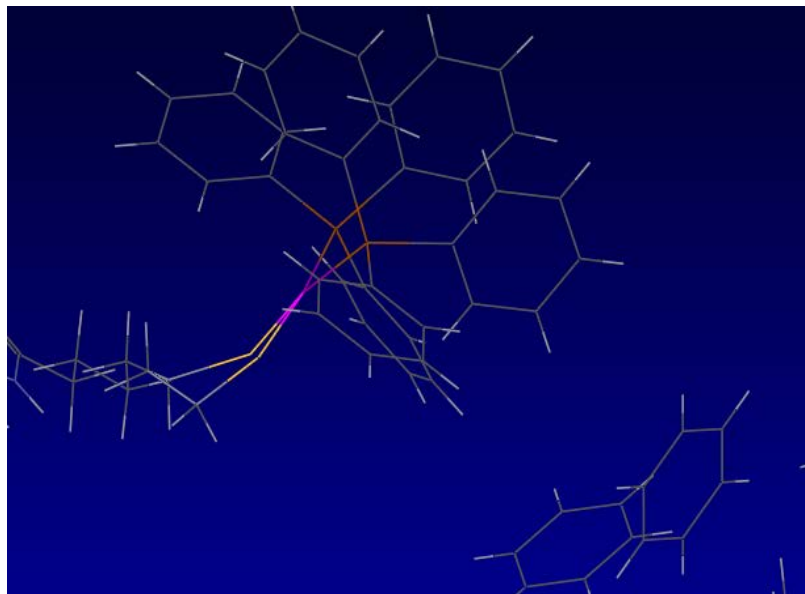
CEWPIE



IJEHIO



PRTTCQ



XAGKOH

## IV.- CONCLUSIONES

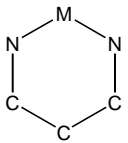
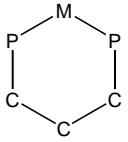
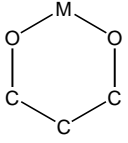
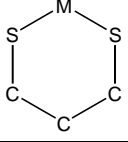
1. A los datos de la búsqueda realizada en 2009 (en **color negro**) para llevar a cabo el anterior Proyecto Fin de Carrera se les ha añadido los de la nueva búsqueda de 2014 para el presente **Trabajo Fin de Grado**, recogiendo en **color rojo** la totalidad de los fragmentos de compuestos quelato simétricos N-N, P-P, O-O y S-S para los metales níquel, paladio y platino. Los resultados obtenidos son:

Compuestos Fragmentos					
níquel		paladio		platino	
<b>1300</b>	<b>1680</b>	<b>114</b>	<b>108</b>	<b>97</b>	<b>109</b>
<b>2582</b>	<b>3319</b>	<b>198</b>	<b>256</b>	<b>136</b>	<b>152</b>
<b>93</b>	<b>110</b>	<b>144</b>	<b>201</b>	<b>124</b>	<b>184</b>
<b>164</b>	<b>220</b>	<b>184</b>	<b>271</b>	<b>175</b>	<b>264</b>
<b>55</b>	<b>87</b>	<b>17</b>	<b>29</b>	<b>77</b>	<b>81</b>
<b>128</b>	<b>181</b>	<b>18</b>	<b>33</b>	<b>86</b>	<b>91</b>
<b>67</b>	<b>72</b>	<b>36</b>	<b>41</b>	<b>24</b>	<b>33</b>
<b>114</b>	<b>120</b>	<b>64</b>	<b>72</b>	<b>38</b>	<b>49</b>
TOTAL					
<b>1515</b>	<b>1949</b>	<b>311</b>	<b>379</b>	<b>322</b>	<b>407</b>
<b>2988</b>	<b>3940</b>	<b>464</b>	<b>632</b>	<b>435</b>	<b>556</b>

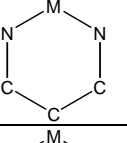
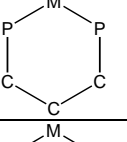
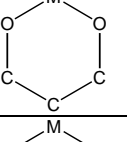
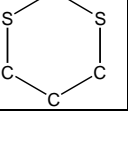
El número total de fragmentos para todos los compuestos estudiados ha aumentado un 32% (desde **3887** a **5128**). Sin embargo, la variación producida en la distribución de los porcentajes de las distintas conformaciones de los fragmentos ha sido baja.

2. Se han comparado dos búsquedas: la de conformaciones con enlaces simples en los anillos (*single*) y la de conformaciones que contienen cualquier tipo de enlace (*any*). Los resultados de los fragmentos obtenidos han sido:



Compuestos Datos disponibles <b>Datos (depurados)</b> Fragmentos <b>Fragmentos (depurados)</b>						
	níquel		paladio		platino	
			166	489	137	287
			154		115	
			<b>108</b>	<b>457</b>	<b>109</b>	<b>251</b>
			268		161	
			<b>256</b>	<b>883</b>	<b>152</b>	<b>409</b>
	126	135	211	256	204	219
	116		206		189	
	<b>110</b>	<b>124</b>	<b>201</b>	<b>247</b>	<b>184</b>	<b>204</b>
	233		277		271	
	<b>220</b>	<b>246</b>	<b>271</b>	<b>323</b>	<b>264</b>	<b>286</b>
	101	677	29	230	104	252
	92		29		86	
	<b>87</b>	<b>620</b>	<b>29</b>	<b>215</b>	<b>81</b>	<b>221</b>
	188		33		97	
	<b>181</b>	<b>1125</b>	<b>33</b>	<b>285</b>	<b>91</b>	<b>278</b>
	86	100	45	48	42	61
	73		41		36	
	<b>72</b>	<b>86</b>	<b>41</b>	<b>44</b>	<b>33</b>	<b>55</b>
	123		42		57	
	<b>120</b>	<b>141</b>	<b>72</b>	<b>76</b>	<b>49</b>	<b>83</b>
Total	<b>521</b>	<b>1512</b>	<b>632</b>	<b>1567</b>	<b>556</b>	<b>1056</b>

Las variaciones en las conformaciones se resumen en la tabla siguiente:

	Aumento de fragmentos estudiados (%) y variación		
	níquel	paladio	platino
		Cambios evidentes SB ↑↑ B↑	Cambios evidentes SB ↑↑ B↑
	sin cambios SB ↑	El mismo n° de C B ↑ SB ↑	Sin cambios SB ↑
	Grandes cambios SB ↑↑ B ↑ E ↑	Grandes cambios SB ↑↑	Grandes cambios SB ↑↑
	Sin cambios SB ↑	Sin cambios	Sin cambios HC ↑ SB ↑

La mayor variación se ha dado en la conformación *screw boat*, cuyo número de fragmentos ha aumentado desde 141 (8.25%) a 2162 (52.29%).

3. En el estudio de las conformaciones *screw boat* para los compuestos de tipo [4], las excepciones a la planaridad se dan en aquellas en las que la probabilidad difiere mucho del valor máximo 1.0000. Esto permite sugerir que cuando aparece probabilidad significativa para otras conformaciones (*envelope* y *half chair*, en este caso) disminuye la planaridad.
4. Las imágenes 3D de los fragmentos, obtenidas mediante el programa *Mercury*, confirman esta sugerencia.