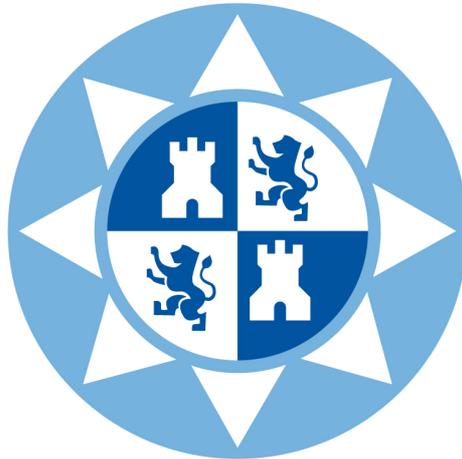


UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial



**REVISIÓN DEL ESTUDIO ESTRUCTURAL DE
SISTEMAS DE 8 ÁTOMOS CON EL FRAGMENTO
N-C-S EN DISPOSICIÓN CABEZA-CABEZA**

TRABAJO FIN DE GRADO
JESÚS MIGUEL GÓMEZ CANO

CARTAGENA, 2012

REVISIÓN DEL ESTUDIO ESTRUCTURAL DE SISTEMAS DE 8 ÁTOMOS CON EL FRAGMENTO N-C-S EN DISPOSICIÓN CABEZA-CABEZA

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

JESÚS MIGUEL GÓMEZ CANO



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MINERA,
GEOLÓGICA Y CARTOGRÁFICA

ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA

D. Luis García González y D. José Luis Serrano Martínez, profesores de la Universidad Politécnica de Cartagena, del Área de Química Inorgánica, como **directores del Trabajo Fin de Grado** titulado: **“Revisión del estudio estructural de sistemas de 8 átomos con el fragmento N–C–S en disposición cabeza-cabeza”**

HACEN CONSTAR:

Que el mencionado Trabajo, ha sido realizado por el alumno **D. Jesús Miguel Gómez Cano,** en el Departamento de Ingeniería Minera, Geológica y Cartográfica, Área de Química Inorgánica.

Cartagena, 26 de septiembre de 2012

Fdo.: Luis García González

Fdo.: José Luis Serrano Martínez

A mi dos amores Azucena y Vega
Que iluminan mi camino con sus sonrisas.

AGRADECIMIENTOS

Quisiera comenzar agradeciendo a todos los miembros del Departamento de Ingeniería Minera, Geológica y Cartográfica, Área de Química Inorgánica., y, en especial, a las personas han hecho posible la realización del presente trabajo con cita especial a Dr. Luis García González y director del presente trabajo y Dr. José Luis Serrano Martínez porque sin su predisposición y esfuerzo este proyecto nunca se hubiera realizado.

No quiero olvidar, a mis compañeros de fatigas que han hecho que este camino sea mucho más sencillo y agradable de llevar, sobre todo gracias a José por hacerme sentir un cartagenero más y ayudarme en todo lo posible, Mari Carmen que ha hecho que el viaje a Cartagena todos los días sea más agradable y Ana y Eva por las risas que nos hemos echado y su compañerismo, a los demás que me dejen gracias a todos por la ayuda que me habéis prestado sabiendo de las dificultades que este año se me han presentado.

Por último y más importante quiero agradecer a Azucena por su paciencia y su gran apoyo en estos momentos difíciles y además de gran felicidad por el nacimiento de nuestra niña Vega que ha sido la estrella que ha puesto el norte en nuestra vida.

Gracias a todos.

INDICE

I.- INTRODUCCIÓN	1
I.1.- Complejos de metales d^8 con ligandos S,N-dadores	1
I.2.- Simetría ^{52,53,54,55}	5
I.3.- Ángulos de torsión	19
I.4.- Uso de mapas polares en análisis conformacional	21
I.4.1.- Ángulos de torsión endocíclicos	22
I.4.2.- Mapas Polares de Ángulos de Torsión	23
I.5.- Objetivos y estructuración del trabajo	25
II.- METODOLOGÍA Y CRITERIOS DE CLASIFICACIÓN	27
II.1.- Medios a utilizar	27
II.1.1.- Base de datos CSD	27
II.1.2.- Programas específicos	34
II.1.3.- Las 10 conformaciones del ciclooctano generadas por el programa <i>Hyperchem</i>	45
II.2.- Selección de las estructuras	50
II.3.- Criterios de clasificación	52
II.3.1.- Metales	52
II.3.2.- Funciones químicas.	55
II.3.3.- Conectividad	64
II.3.4.- Conformación	77
III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN	82
III.1.- Estudio detallado de la conformación de los anillos de 8 miembros con el fragmento N-C-S en disposición Cabeza-Cabeza.	82
III.2.- Criterios utilizados	82
III.2.1.- Metales	83
III.2.2.- Conformaciones.	85
III.3.- Parámetros Químicos	94
III.3.1.- Distancia N-C y C-S.	94
III.3.2.- Distancia entre metales	97
IV.- CONCLUSIONES	99
IVa.- Conclusiones 2006	99
IVb.- Conclusiones 2012	102
V.- BIBLIOGRAFÍA	104
APÉNDICES	107
Apéndice 1:	107
Apéndice 2:	115
Apéndice 3:	132

I.- INTRODUCCIÓN

El presente Trabajo Fin de Grado es una revisión y ampliación del Proyecto Fin de Carrera presentado el día 1 de junio de 2006 para optar al título de Ingeniero Técnico Industrial en la especialidad de Química Industrial. La finalidad de esta revisión es ampliar ese PFC y poder optar al nuevo título de la Universidad Politécnica de Cartagena acorde con los postulados de Bolonia: Grado en Ingeniería Química Industrial.

En los 6 años transcurridos entre ambos trabajos el número de compuestos estudiados ha aumentado considerablemente, casi se ha duplicado, lo que permite no variar apreciablemente la estructura del primer Proyecto, ampliando el estudio en el segundo al observar y discutir las variaciones que se hayan podido producir.

Para deslindar ambos, en lo que a datos y discusiones se refiere, se mantiene, sin cambios, todo el Proyecto de 2006 y **se añade en color rojo, a partir de ahora, cualquier modificación que se produzca. En las tablas, los nuevos datos se mostrarán junto con los antiguos pero en distinto color.**

I.1.- Complejos de metales d^8 con ligandos S,N-dadores

En los últimos años ha cobrado un considerable interés la química de ligandos polidentados con átomos dadores duros y blandos. En este sentido, los heterociclos-2-tiolato son ricos en electrones y, en muchos casos, ligandos polifuncionales que pueden presentar una amplia variedad de modos de coordinación formando complejos monómeros y polímeros¹⁻⁴. Los compuestos con estos ligandos han recibido una considerable atención en la bibliografía, tanto en reacciones estequiométricas como en reacciones catalíticas. Recientemente, Raper ha estudiado complejos de tiones heterocíclicas con metales del grupo 12⁵⁻⁷ y ditiolatos de níquel (II)⁸.

Desde el punto de vista de los átomos dadores podemos incluir ligandos como los aminotiolatos, aminoalcoholes y cetonas heterocíclicas, aunque presentan menor versatilidad.

Los complejos tienen un amplio rango de aplicaciones³, incluyendo el uso para imitar las propiedades electrónicas y estructurales de sitios activos en

metaloenzimas^{9,10}, el tratamiento de la artritis reumatoide¹¹ o interesantes propiedades anticarcinogénicas^{12,15,70}.

En el caso de las tiones heterocíclicas, la combinación de un grupo tiona exocíclico y una molécula heterocíclica que contiene nitrógeno y azufre, genera un conjunto de moléculas orgánicas con una considerable capacidad coordinativa potencial. Un aspecto importante relacionado con esta capacidad potencial es su tautomerismo protontrópico¹⁶ y, en particular, qué forma tautómera está presente en la disolución inmediatamente antes de la formación del enlace metal-ligando.

Una característica común a todos los heterociclos nitrogenados con un grupo tiona es la presencia de las formas tautómeras tiol-tiona:

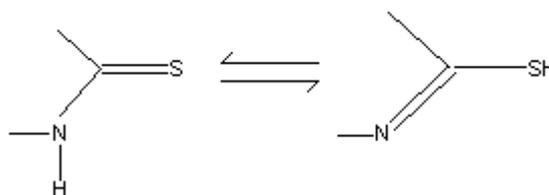


Figura 1

Los estudios cristalográficos indican que, en estado sólido, la forma predominante es la tiona¹, hecho que está avalado por su espectro infrarrojo, el cual muestra una banda de 3100 cm^{-1} aproximadamente, característica de la vibración de tensión N-H¹⁷ y la ausencia de bandas debidas a la vibración SH a 2500 cm^{-1} y la presencia de las bandas propias de las tioamidas debido al intenso acoplamiento de la actividad vibracional de CH, NH, CN y CS¹⁸. Además, sus espectros de RMN de ^1H indican que también predomina la forma tiona en disolución, con unos desplazamientos químicos que son más consistentes, con grupos imido (NH, 8-11 ppm) que con grupos tiol (SH, 3-4 ppm).

Los equilibrios tautómeros pueden modificarse en disolución por cambios en el pH del medio. Con valores de pKa que varían entre 5 y 11, la desprotonación es posible en un amplio rango de pH y el anión tiolato formado puede actuar como:

- a) ligando monodentado aniónico S-dador^{18,19}
- b) ligando bidentado quelato S,N-dador^{20,21}

- c) ligando exobidentado puente S,N a dos centros metálicos μ_2 -S,N^{22,23}
- d) puente a tres átomos metálicos^{24,25,26}.

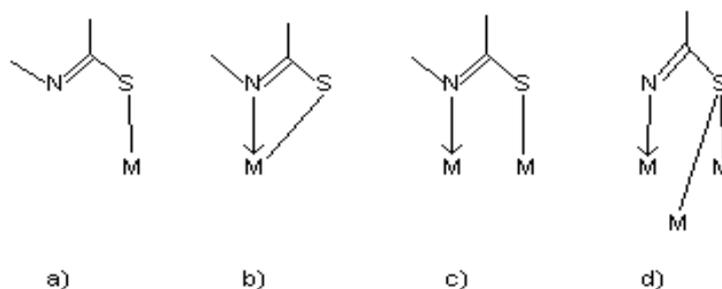


Figura 2

Estas moléculas se desprotonan con facilidad por medio de hidróxido sódico²⁷ o potásico²⁸ acuoso o alcohólico. Los disolventes orgánicos también desprotonan a algunas tionas heterocíclicas, especialmente en presencia de una sal metálica²⁹⁻³¹, y bases orgánicas tales como trimetilamina³² o trietilamina³³ se han empleado con éxito como agentes desprotonantes en muchos disolventes orgánicos. Los procedimientos **que utilizan** incluyen sodio en metanol³⁴ o etanol³⁵ así como hidróxido sódico en éter³⁶.

Muchos de los compuestos de paladio (II) y platino (II) con ligandos tionato heterocíclicos muestran una geometría plano-cuadrada en la que estos ligandos actúan como puentes de S terminales^{37,38}, quelatos bidentados^{31,39,40} o bidentados puente^{41,42}. El anillo de cuatro miembros formado por un tionato heterocíclico quelato S,N está inherentemente tensionado y, por esta razón, muchos complejos están formalmente llamados a contener ligandos puente S,N mejor que quelato S,N³. La publicación de la estructura cristalina de *cis*-[Ru(py2S)₂(PPh₃)₂]⁴³ estableció la capacidad quelante de estos ligandos, aunque los complejos tetracoordinados monoquelato son todavía relativamente raros³.

Se han descrito complejos mononucleares de paladio (II) y platino (II) con el ligando 2-piridintiolato y fosfinas terciarias con estequiometrías [M(pyS)₂(PPh₃)₂], [MCl(pyS)(PPh₃)] y [M(pyS)₂(PPh₃)] (M=Pd,Pt)³¹. La estrategia de síntesis utilizada fue la adición oxidativa de dipiridil-2,2'-disulfuro a [M(PPh₃)₄] en tolueno y atmósfera de

nitrógeno, produciendo el complejo *trans*-[MpyS)₂(PPh₃)₂] con alto rendimiento, en el que el ligando actúa como monodentado aniónico S-dador. Mediante estudios de RMN-¹H y ³¹P, y determinaciones de pesos moleculares se sugiere que, en disolución, hay un equilibrio de disociación del tipo:

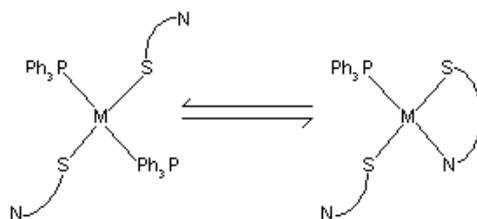


Figura 3

Por otra parte, cuando se hace reaccionar 2-mercaptopiridina con metóxido de sodio y la mezcla se añade a una disolución del complejo [Pd₂Cl₄(PPh₃)₂] en tetrahydrofurano se produce la sustitución de los puentes de halógeno por puentes de tiolato (μ₂-Spy) dando el complejo [{PdCl(μ-Spy)(PPh₃)}₂] que evoluciona rápidamente para dar el compuesto mononuclear [PdCl(Spy)(PPh₃)], donde el ligando 2-piridintionato actúa como ligando quelato S,N-dador como consecuencia de la mayor estabilidad de este complejo respecto de la especie dímera. De la resolución de su estructura por difracción de rayos X se deduce que la geometría plano cuadrada está muy distorsionada, existiendo dos moléculas independientes en la celda unidad con diferentes posiciones de los anillos de piridina con diferencias significativas en las siguientes longitudes de enlace (Pd-S = 2.320 y 2.289 Å; Pd-N = 2.112 y 2.046 Å) y ángulos (S-Pd-N = 73.9 y 67.3°). En cualquier caso, no se han podido aislar por los métodos de síntesis convencionales complejos mononucleares con ligandos tionato heterocíclicos y dos moléculas de fosfina en la esfera de coordinación de un metal d⁸.

Otros ligandos S,N-dadores aniónicos conocidos desde hace muchos años son las β-mercaptoaminas. Desde el punto de vista de la coordinación presentan menos posibilidades coordinativas que los heterociclos-2-tiolato debido a que pueden formar un anillo de cinco miembros con el átomo metálico y comportarse como un ligando quelato convencional. Sin embargo, la capacidad de los átomos de azufre para formar puentes entre átomos metálicos ha permitido, por una parte, la formación de

complejos polinucleares y, en ocasiones, ha impedido la formación de complejos mononucleares mixtos con otros ligandos neutros o aniónicos. En el caso de iones d^8 , Jicha⁴⁴ y Busch⁴⁵ estudiaron el comportamiento del ligando aminometil-2-tiolato, $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{S}$ -, en compuestos de Ni(II) y Pd(II) encontrando, en el caso del ion paladio(II), una gran tendencia a la formación del isómero *cis*. Además, para el catión níquel (II), se formaba, en función de las condiciones de trabajo, una especie trinuclear de fórmula $[\text{Ni}_3(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{S})_4]\text{Cl}_2$:

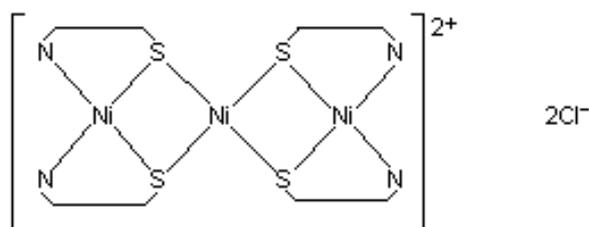


Figura 4

Se han intentado utilizar ligandos β -mercaptoaminas para obtener complejos mononucleares mixtos de los metales del grupo 10 usando como precursores halocomplejos con ligandos fosfina^{46,47}. En todos los casos, los intentos han sido infructuosos ya que se obtienen complejos di- y polinucleares en los que el grupo tiolato actúa como ligando puente. Sin embargo, Jensen y colaboradores, utilizando como precursor el halocomplejo de platino $[\text{PtCl}_2(\text{PMe}_3)_2]$ o el hidroxocomplejo $[\{\text{Pt}(\text{PMe}_3)_2(\mu\text{-OH})\}_2]^{2+}$, estabilizaron el complejo de Pt(II) con cisteína como ligando bidentado quelato aniónico N,S-dador⁴⁸.

La reacción directa entre di- μ -hidroxo complejos de los metales del grupo 10 con heterociclos-2-tiona ha permitido aislar complejos mononucleares mixtos, con los ligandos heterociclo-2-tiolato actuando como bidentados quelato con diferentes fragmentos metálicos^{49-51,71,72}.

I.2.- Simetría^{52,53,54,55}

Generalmente las moléculas se describen mediante calificativos tales como *tetraédrica*, *octaédrica*, etc. en lugar de hacerlo mediante los llamados *grupos puntuales* pese a que éstos tienen una mayor precisión. No obstante, para nuestro

estudio es más apropiado hacerlo por este segundo método. Se trata de una poderosa herramienta que es fundamental para comprender la relación existente entre estructura y espectroscopia. Así, es la fuente del conocimiento que tenemos de que una molécula o ion tetraédrico, de fórmula AB_4 , posee cuatro modos normales de vibración, todos activos en el Raman, pero sólo dos de ellos activos en el infrarrojo; por otra parte, cualquier molécula o ion plano-cuadrado, con el mismo tipo de fórmula, debe tener siete modos normales de vibración, tres activos en el Raman, otros tres activos en el infrarrojo e inactivo el restante. Por esta razón, se puede fácilmente distinguir las estructuras tetraédricas de las plano-cuadradas mediante los espectros infrarrojo y Raman. En definitiva, el estudio de los elementos de simetría es un poderoso estímulo para tener un sentido tridimensional de la química y para la mejor comprensión de la literatura científica que, a veces, utiliza los símbolos de Schoenflies de grupos puntuales como C_{2v} o D_{3h} .

En el estudio de la simetría hay que tener en cuenta dos partes: las *operaciones de simetría* y los *elementos de simetría*. Una operación es de simetría si al aplicarla a una molécula o ion aislado la especie queda en una configuración indistinguible de la original y, por tanto, es superponible con ella. Si se considera, por ejemplo, una molécula de agua (Figura 4) y se gira 180° (π radianes) respecto de un eje situado en el plano molecular y que es bisectriz del ángulo HOH, la configuración resultante puede superponerse con la original. La rotación de esta molécula es una operación de simetría, y el elemento de simetría es el eje respecto del cual se ha realizado la rotación. Se dice que un eje es de orden n si la rotación de $2\pi/n$ lleva a la molécula a una configuración superponible con la primitiva. El eje mostrado en la figura, que es el de máxima simetría para la molécula de agua, es un eje binario.

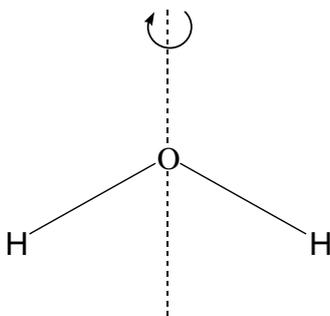


Figura 5.- Molécula de agua, H_2O

Hay cinco tipos de operaciones de simetría posibles, a las que corresponden, respectivamente, cinco elementos de simetría básicos:

1.- Rotación (operación de simetría) respecto de un eje de simetría, C_n , de orden n (elemento de simetría).

Como ejemplo, la molécula de agua (Figura 5) posee un eje de simetría binario C_2 , y la molécula plana BF_3 un eje ternario C_3 , perpendicular al plano molecular y tres ejes binarios C_2 según cada enlace B-F (Figura 6):

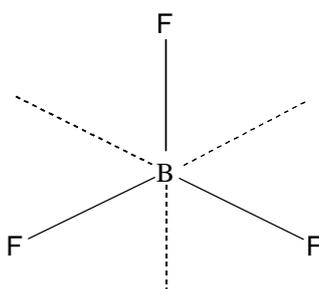


Figura 6.- Molécula plana BF_3

2.- Reflexión respecto de un plano de simetría (plano especular), σ .

Si la reflexión de todas las partes de la molécula en un plano lleva a ésta a una configuración indistinguible, dicho plano es de simetría.

Así, la molécula de agua posee dos planos de simetría, conteniendo cada uno de ellos el eje C_2 (el eje de simetría máxima). Reciben el nombre de *planos verticales* y se les asigna el subíndice v . El plano σ_v es perpendicular al plano de la molécula, denominado σ'_v (dando por supuesto que los átomos individuales son simétricos respecto del plano molecular). Como ejemplo, la molécula BF_3 (Figura 5) tiene tres planos de simetría verticales que contienen el eje C_3 .

3.- Reflexión respecto a un centro de simetría (centro de inversión), i .

Si la reflexión de todas las partes de la molécula respecto del centro de ella origina una configuración indistinguible, dicho centro es de simetría (o de inversión). Es el análogo, en tres dimensiones, del plano bidimensional de simetría. El ion plano $[ICl_4]^-$

tiene un centro de simetría mientras que la molécula tetraédrica CCl_4 no lo posee (Figura 7):

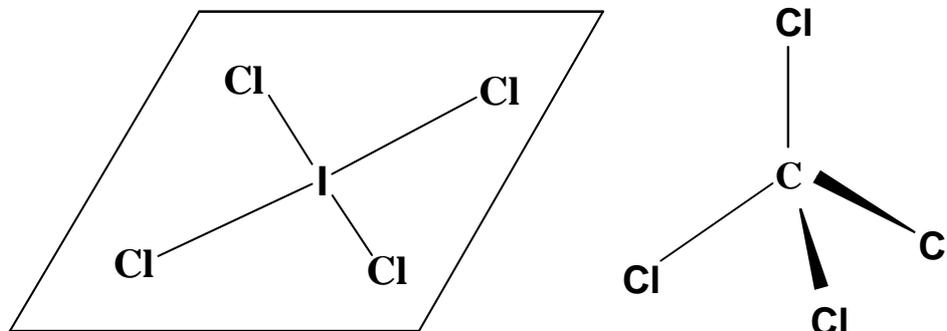


Figura 7.- Ion plano $[\text{ICl}_4]^-$ y molécula tetraédrica CCl_4

4.- Rotación respecto de un eje, seguida de una reflexión respecto de un plano perpendicular a dicho eje, S_n .

Si una rotación de $2\pi/n$ respecto de un eje, seguida de la reflexión de un plano perpendicular a él da una configuración indistinguible, el eje es un eje de rotación-reflexión de orden n . En ocasiones dicho eje se denomina *eje rotacional impropio*, para distinguirlo del *eje rotacional simple o propio*.

Por ejemplo, la molécula CH_4 tiene tres ejes S_4 coincidentes con los tres ejes C_2 que bisecan los ángulos HCH. En la Figura 8 se presenta la molécula vista desde uno de sus cuatro enlaces C-H. Estos elementos de simetría se deben estudiar, si es posible, con la ayuda de modelos moleculares.

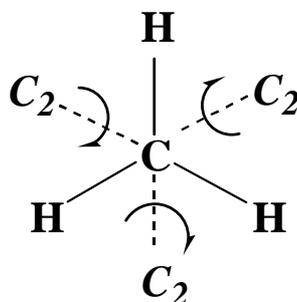


Figura 8.- Molécula CH_4 vista desde uno de los enlaces C-H (se omite el H por claridad)

5.- Operación identidad, E.

La operación de rotación de 2π radianes, equivalente a no hacer nada, es el elemento de simetría de la identidad y al aplicarlo, la molécula queda inalterada.

El motivo de su inclusión se debe a que el estudio de la simetría se mueve en el mundo abstracto de las matemáticas y, para que éste sea coherente, no se le puede obviar. Así, si consideramos el conjunto de los elementos de simetría de una molécula cualquiera observaremos que dichos elementos tienen estructura de grupo. La operación del grupo consistirá en aplicar sucesivamente las operaciones correspondientes a cada uno de los factores. El elemento neutro del grupo, E, será la identidad: la operación identidad transforma una molécula en ella misma. En la Figura 9 se ilustra, como ejemplo, el caso de la molécula de agua. El resto de las propiedades del grupo (asociativa y existencia de elemento inverso) es fácil de comprobar.

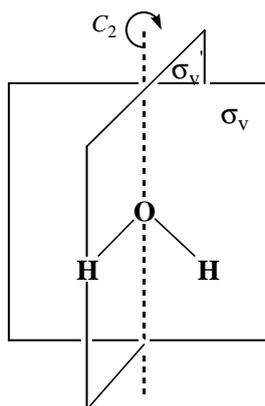


Figura 9.- Elementos de simetría de la molécula de agua

La molécula de agua y todas aquellas moléculas, objetos o conjuntos de puntos que posean las propiedades de simetría reflejadas en la Figura 9 y resumidas en la Tabla de multiplicación que se ofrece a continuación, se dice que pertenecen al grupo puntual de simetría C_{2v} :

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
E	E	C_2	σ_v	σ_v'
C_2	C_2	E	σ_v'	σ_v
σ_v	σ_v	σ_v'	E	C_2
σ_v'	σ_v'	σ_v	C_2	E

Tabla 1

De la misma forma, cualquier molécula pertenece a un grupo puntual de simetría. Seguidamente vamos a estudiar los grupos más frecuentes en los compuestos que se investigan en el Área de Química Inorgánica, así como los elementos de simetría que caracterizan a cada grupo mediante algún ejemplo aclaratorio.

Grupos puntuales

El número y la naturaleza de los elementos de simetría de una molécula dada vienen determinados por su *grupo puntual* (o *grupo de simetría*), que tiene un símbolo del tipo C_2 , C_{2v} , D_{3h} , O_h , T_d , etc. Cuando éstos se describen, se dividen en grupos C , grupos D y grupos espaciales.

Los grupos puntuales a los que se les asigna el símbolo C tienen un eje rotacional de simetría. Cuando se trata de un eje de orden 1, la molécula debe girarse 360° para que sea superponible con la configuración primitiva, el grupo puntual es C_1 y equivale a decir que el único elemento de simetría es el que corresponde a la identidad, E . El compuesto CHFClBr (Figura 10) es un ejemplo de molécula perteneciente a este grupo:

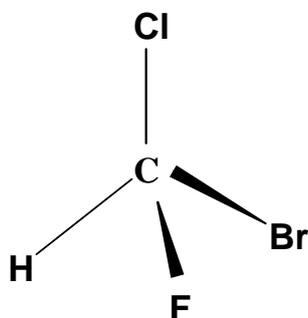


Figura 10.- Molécula CHFClBr

Si además del elemento identidad E , que no volveremos a mencionar ya que lo tienen todas las moléculas, hay solamente un plano de simetría, el símbolo del grupo puntual es C_s , como sucede con los compuestos HOCl (Figura 11) o SO_2ClF :

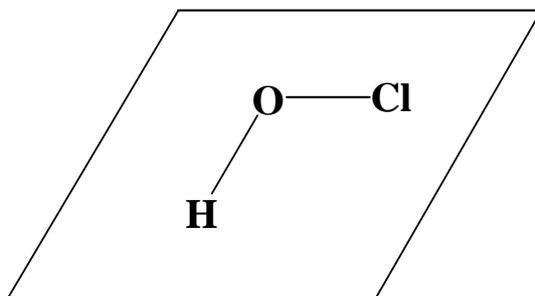


Figura 11.- Molécula HOCl

Si hay solamente un centro de simetría, el símbolo es C_i , como es el caso de la configuración escalonada CHClF.CHClF.

Los grupos puntuales designados con el símbolo general C_n poseen un eje rotacional de simetría. Así, la molécula de peróxido de hidrógeno, H_2O_2 , tiene una configuración de “libro abierto” con los átomos de oxígeno situados sobre el lomo y los átomos de hidrógeno en las páginas, como se observa en la Figura 12. El enlace O–O y el único elemento de simetría, el eje C_2 , se encuentran en un plano, con un átomo de hidrógeno por encima del mismo y el otro átomo por debajo: el grupo puntual es C_2 .

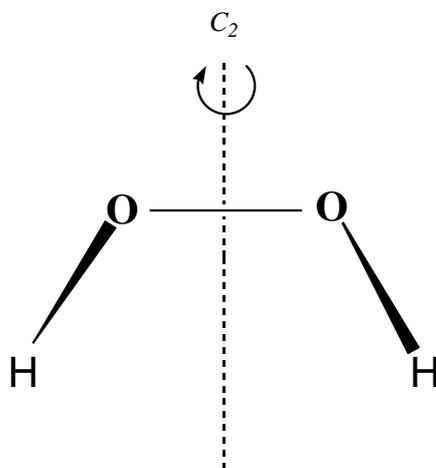


Figura 12.- Molécula H_2O_2

Si además de un eje rotacional C_n , una molécula tiene también n planos verticales de simetría, es decir, planos que contienen el eje C_n , el grupo puntual es C_{nv} . Es el caso de la molécula de agua (Figuras 5 y 9) y de CH_2Cl_2 (Figura 13), que pertenecen al grupo C_{2v} :

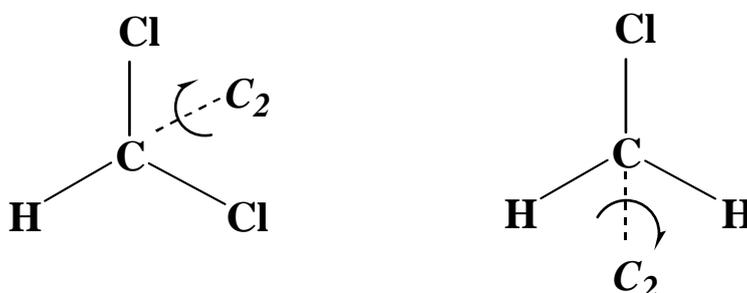


Figura 13. -Molécula CH_2Cl_2 , vista desde el enlace C-H y C-Cl (se omiten H y Cl respectivamente)

El amoníaco, el cloroformo (CHCl_3), y el clorometano (CH_3Cl), Figura 14, pertenecen al grupo puntual C_{3v} . En el amoníaco, el eje C_3 es perpendicular al plano del papel (está en la dirección N-) y tiene, además, tres planos que contienen a dicho eje; en el CHCl_3 y CH_3Cl y ocurre igual que en el amoníaco, pero sustituyendo N-: por C-H y C-Cl, respectivamente:

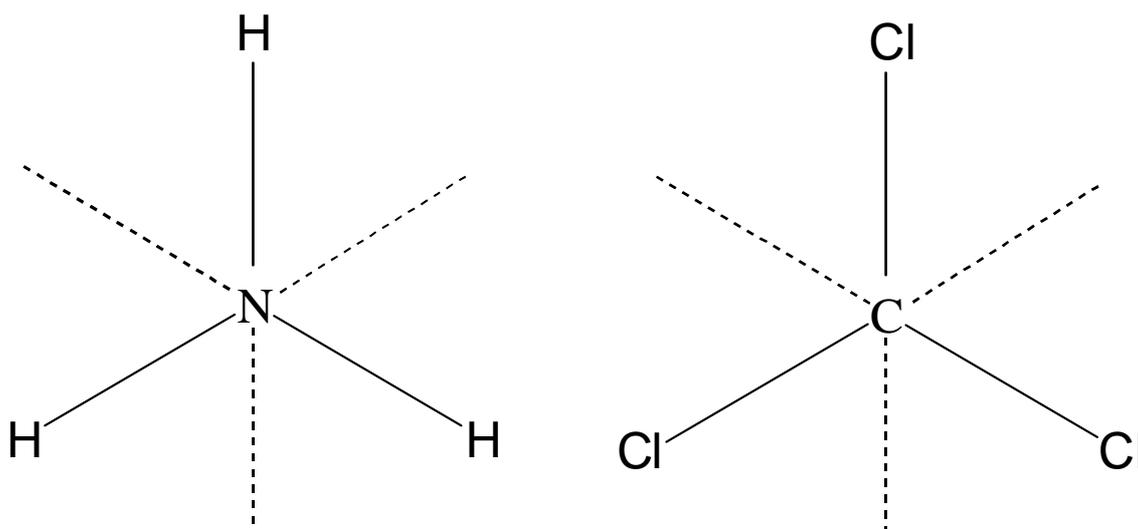


Figura 14.- Moléculas de amoníaco y cloroformo (CHCl_3)

La molécula de BrF_5 (Figura 15) pertenece al C_{4v} : tiene un eje C_4 , perpendicular al plano del papel, que coincide con la dirección de uno de los enlaces $\text{Br}-\text{F}$ y cuatro planos que contienen a dicho eje:

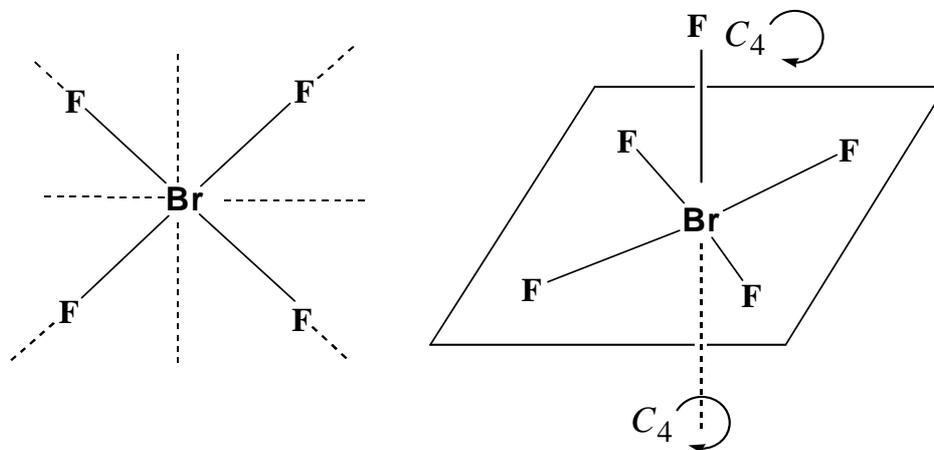


Figura 15.- Molécula de BrF_5

Las moléculas lineales asimétricas HCl , HCN y OCS pertenecen al grupo puntual $C_{\infty v}$: poseen un eje C_{∞} (en la dirección de la molécula) e infinitos planos verticales que lo contienen.

Si además del eje rotacional C_n hay un plano de simetría perpendicular al eje C_n (un *plano horizontal*, cuyo símbolo es σ_h), el grupo puntual es C_{nh} .

El compuesto *trans*- $\text{CHCl}=\text{CHCl}$ (Figura 16) pertenece al grupo puntual C_{2h} ya que tiene un eje C_2 perpendicular al plano del papel, que es el plano de simetría:

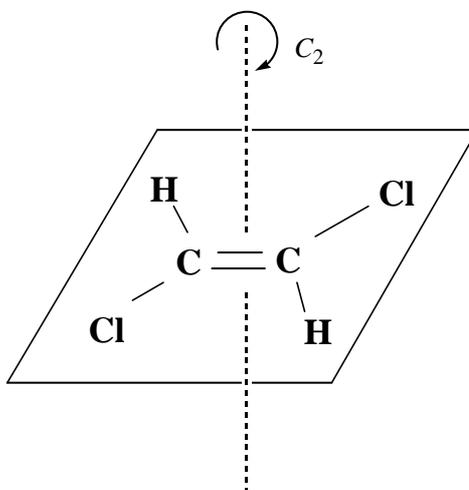


Figura 16.- Molécula de *trans*-1,2-dicloroeteno

El ácido bórico, $B(OH)_3$, molécula plana (Figura 17), pertenece al grupo puntual C_{3h} ya que tiene un eje C_3 perpendicular al plano de simetría:

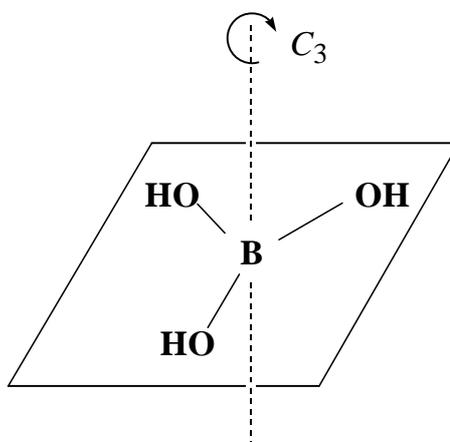


Figura 17.- Molécula de ácido bórico

Una molécula que posea un eje de simetría C_n y n ejes C_2 perpendiculares al eje C_n pertenece al grupo puntual D_n . Aunque este grupo no es muy corriente, un ejemplo de especie perteneciente al grupo puntual D_3 es el ion $[Co(en)_3]^{3+}$, donde **en** = etilendiamina o 1,2-diaminoetano.

Si además del eje C_n y de los n ejes C_2 perpendiculares a él, una molécula tiene un plano de simetría horizontal (es decir, un plano perpendicular al eje C_n), entonces pertenece al grupo puntual D_{nh} . Debemos resaltar que las moléculas de este tipo tienen también n planos de simetría verticales y un centro de simetría, pero es el reconocimiento del plano de simetría horizontal el que importa a la hora de asignarlas al grupo puntual D_{nh} . Ejemplos de especies pertenecientes a estos grupos puntuales son:

- a) Diborano, B_2H_6 (D_{2h}) (Figura 18): tiene un plano horizontal, el de la molécula, un eje C_2 perpendicular a dicho plano y dos ejes C_2 perpendiculares al anterior y, por tanto, contenidos en el plano:

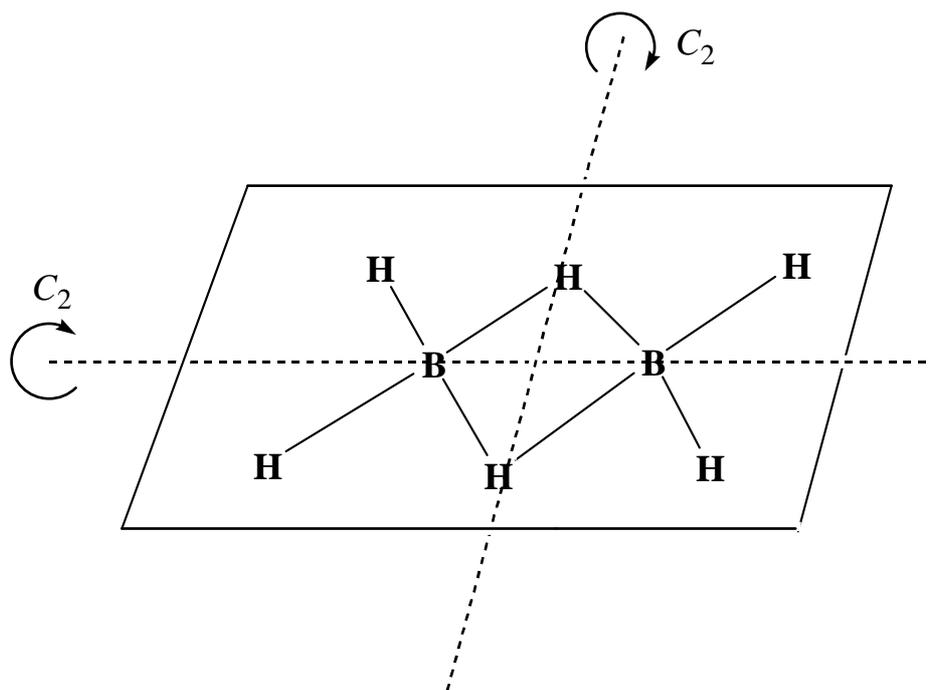


Figura 18.- Molécula de diborano

- b) BCl_3 (D_{3h}),
- c) $[\text{BrF}_4]^-$ (D_{4h}) y
- d) Benceno, C_6H_6 (D_{6h}) (Figura 19), que tiene un plano de simetría, el de la molécula, un eje C_6 perpendicular al mismo y seis ejes C_2 perpendiculares al anterior:

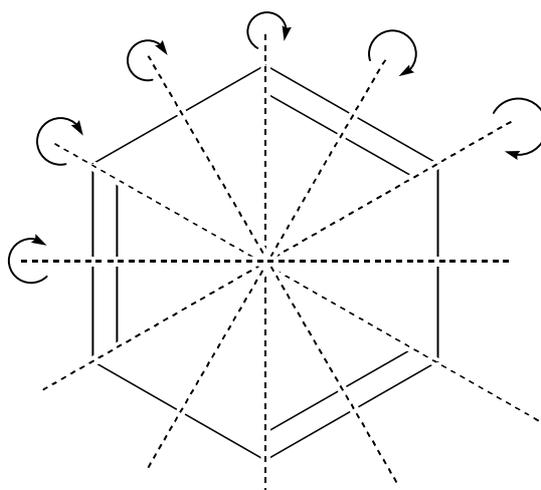


Figura 19.- Molécula de benceno

Una molécula lineal simétrica como CO_2 o Cl_2 pertenece al grupo puntual $D_{\infty h}$: tiene un eje C_1 perpendicular al plano que contiene a la molécula e infinitos ejes C_2 perpendiculares al C_1 .

Si además de un eje de simetría C_n y n ejes binarios C_2 perpendiculares a él, hay n planos de simetría que contienen el eje C_n y bisecan los ángulos formados por los ejes C_2 (*planos diedros*, σ_d), el grupo puntual es D_{nd} . Las conformaciones *boat boat* (BB) y *boat* (B) del ciclooctano (que se estudian más adelante) son D_{2d} ya que tienen un eje C_2 perpendicular al plano del papel, dos planos, perpendiculares entre sí, que contienen al eje C_2 y dos ejes C_2 que bisecan a los dos planos. Asimismo, la configuración *crown* (C) es D_{4d} pues tiene un eje C_4 perpendicular al plano del papel, cuatro planos perpendiculares entre sí, dos a dos, que contienen a dicho eje C_4 y 4 planos C_2 perpendiculares al eje C_4 .

Finalmente, hay unos cuantos grupos puntuales especiales a los que pertenecen las moléculas con un alto grado de simetría.

Así, el tetraedro regular, ya estudiado en el caso del metano, CH_4 , pertenece al grupo puntual T_d el cual tiene un conjunto de cuatro ejes C_3 , otro conjunto de tres ejes S_4 y un tercer conjunto de seis planos de simetría diedros (los ejes S_4 son coincidentes con los ejes C_2 que bisecan los ángulos HCH). Para mayor claridad véase la Figura 20 en la que los átomos que descansan en el plano del papel se marcan con un círculo blanco y los que están fuera con uno negro. La operación de simetría que se describe es la S_4 , es decir, rotación de $2\pi/4 = 90^\circ$ seguida de reflexión respecto al plano perpendicular (que pasa por el centro de la molécula y punto de corte de ambos elementos de simetría):

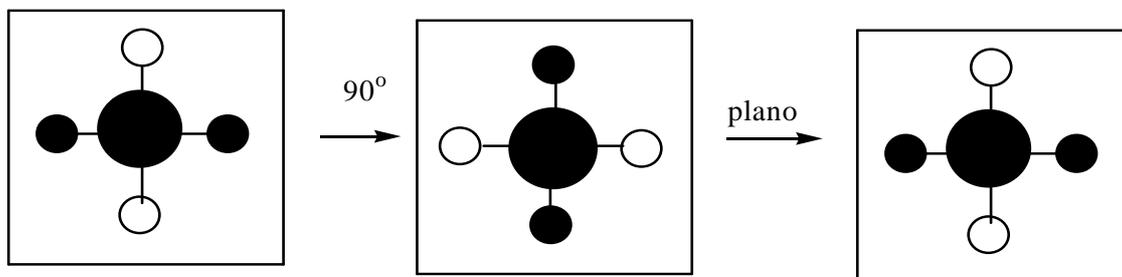


Figura 20.- Operación de simetría S_4 aplicada al CH_4

El cubo y el octaedro regular (SF_6 , por ejemplo) pertenecen al grupo puntual O_h que contiene un elevado número de elementos de simetría: 9 planos, 3 ejes C_4 (que son también S_4), 4 ejes C_3 , 6 ejes C_2 y un centro de simetría. Tres de los planos pasan por la mitad de las aristas situadas en caras opuestas y cada uno contiene un eje C_4 , que también es C_2 . Los otros seis planos pasan por las diagonales de las caras paralelas y cada uno contiene un eje C_2 que pasa por el centro de simetría. Finalmente, posee 4 ejes C_3 que coinciden con las diagonales trazadas desde vértices opuestos, pasando también por el centro de simetría.

Existen otros muchos grupos puntuales, algunos de los cuales se recogen en la página siguiente junto a sus elementos de simetría.

Para concluir, en la Figura 21 se expone un esquema que permite la deducción de grupos puntuales de moléculas e iones.

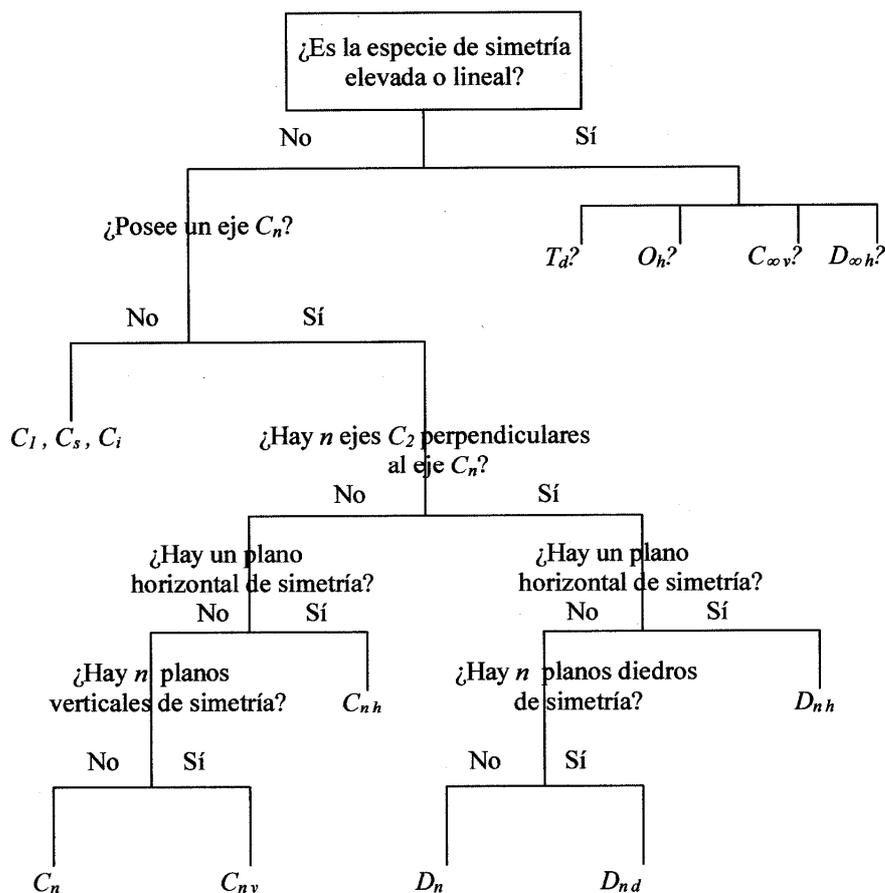


Figura 21

Grupos puntuales	Elementos de simetría											
C_1	E											
$C_s = C_h$	E	σ_h										
$C_i = S_2$	E	i										
C_2	E	C_2										
C_3	E	C_3	C_3^2									
C_4	E	C_4	C_2	C_4^3								
C_5	E	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4							
C_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5						
C_7	E	C_7	C_7^2	C_7^3	C_7^4	C_7^5	C_7^6					
C_8	E	C_8	C_4	C_8^3	C_2	C_8^5	C_4^3	C_8^7				
D_2	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$								
D_3	E	$2C_3$	$3C_2$									
D_4	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$							
D_5	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$								
D_6	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$						
C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$								
C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$									
C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$							
C_{5v}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5\sigma_v$								
C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$						
C_{2h}	E	C_2	i	σ_h								
C_{3h}	E	C_3	C_3^2	σ_h	S_3	S_3^5						
C_{4h}	E	C_4	C_2	C_4^3	I	S_4^3	σ_h	S_4				
C_{5h}	E	C_5	C_5^3	C_5^4	σ_h	S_5	S_5^7	S_5^3	S_5^9			
C_{6h}	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	I	S_3^5	S_6^5	σ_h	S_6	S_3
D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	I	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$				
D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$						
D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
D_{5h}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$				
D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C'_2$	$3C''_2$	I	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C'_2$	$2\sigma_d$							
D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$						
D_{4d}	E	$2S_8$	$2C_4$	$2S_8^3$	C_2	$4C'_2$	$4\sigma_e$					
D_{5d}	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	I	$2S_{10}^3$	$2S_{10}$	$5\sigma_d$				
D_{6d}	E	$2S_{12}$	$2C_6$	$2S_4$	$2C_3$	$2S_{12}^5$	C_2	$6C'_2$	$6\sigma_d$			
S_4	E	S_4	C_2	S_4^3								
S_6	E	C_3	C_3^2	i	S_6^5	S_6						
S_8	E	S_8	C_4	S_8^3	C_2	S_8^5	C_4^3	S_8^7				
T	E	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$								
T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$							
T_h	E	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	I	$4S_6$	$4S_6^2$	$3\sigma_d$				
O	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C'_2$							
Oh	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		

Grupos puntuales	Elementos de simetría										
	I	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$					
I_h	E	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	i	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	15σ	
$C_{\infty v}$	E	C_2	$2C_{\infty\phi}$	$\infty\sigma_v$						
$D_{\infty h}$	E	$2C_{\infty\phi}$	$\infty\sigma_v$	I	$2S_{\infty\phi}$	∞C_2			

Tabla 2

I.3.- 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 22 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.

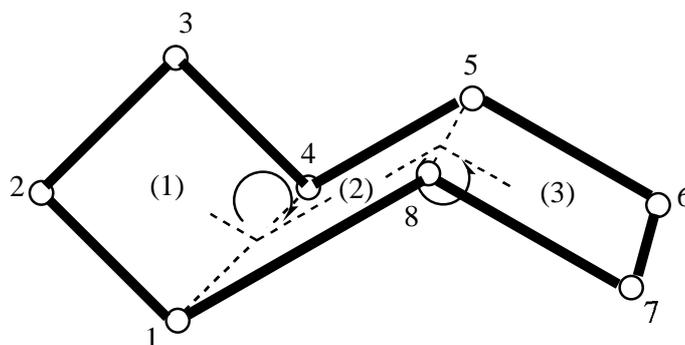


Figura 22

Un ángulo de *torsión* es un caso especial de ángulo diedro. Como se muestra en la Figura 23, 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.

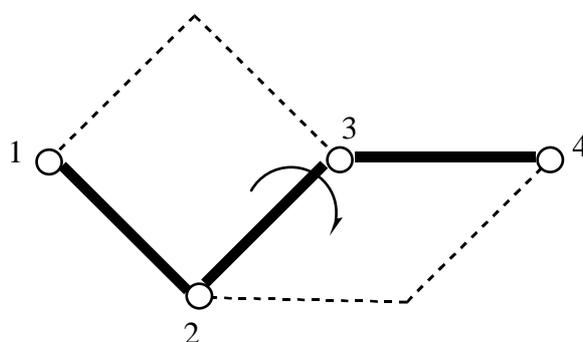


Figura 23

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 medida 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 24, 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.

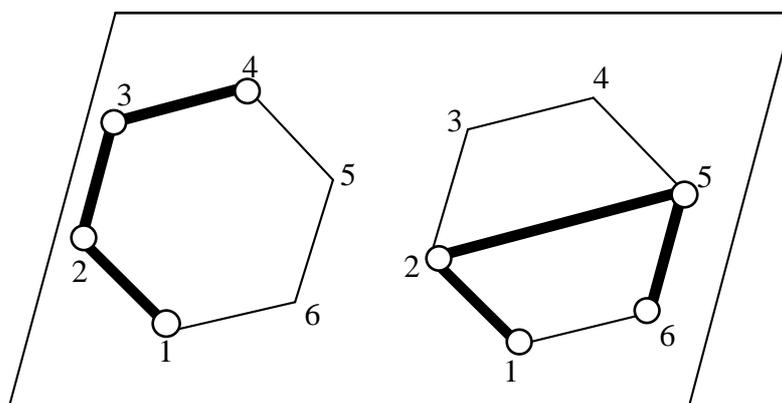


Figura 24

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:

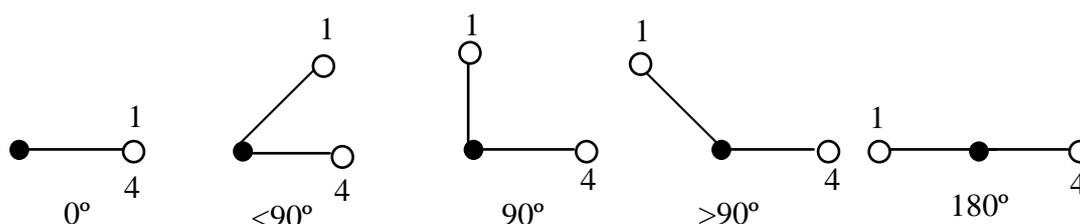


Figura 25

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 10 conformaciones canónicas del ciclooctano. Esta comparación se realizará, precisamente, mediante los ángulos de torsión.

En la Tabla 3 se recogen las 10 conformaciones del ciclooctano y sus ángulos de torsión característicos τ_1 - τ_8 ⁵⁶ medidos en grados.

Conformación	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC
τ_1	87.5	52.5	64.9	-73.5	119.9	37.3	56.2	66.0	65.0	88.0
τ_2	-87.5	52.5	37.6	0.0	-76.2	-109.3	-82.4	-105.2	44.7	-93.2
τ_3	87.5	-52.5	-64.9	73.5	0.0	109.3	114.6	105.2	-102.2	51.9
τ_4	-87.5	-52.5	-37.6	0.0	76.2	-37.3	-82.4	-66.0	65.0	44.8
τ_5	87.5	52.5	64.9	-73.5	-119.9	-37.3	56.2	66.0	-65.0	-115.6
τ_6	-87.5	52.5	37.6	0.0	76.2	109.3	-82.4	-105.2	102.2	44.8
τ_7	87.5	-52.5	-64.9	73.5	0.0	-109.3	114.6	105.2	44.7	51.9
τ_8	-87.5	-52.5	-37.6	0.0	-76.2	37.3	-82.4	-66.0	-65.0	-93.2
Simetría	D_{4d}	D_{2d}	S_4	D_{2d}	C_{2h}	C_{2h}	D_2	C_{2v}	C_s	C_2

Tabla 3.- Ángulos de torsión para las 10 conformaciones del ciclooctano

CR: *crown*

BB: *boat boat*

S: *sofa*

B: *boat*

C: *chair*

TC: *twist chair*

TCC: *twist chair chair*

CC: *chair chair*

BC: *boat chair*

TBC: *twist boat chair*

En el Apéndice 1 se recogen los valores de los 8 ángulos de torsión de todas las conformaciones utilizadas en el presente trabajo.

I.4.- Uso de mapas polares en análisis conformacional

El análisis de los signos de los ángulos de torsión se aplica desde hace mucho tiempo al análisis conformacional de sistemas de anillos pequeños y medianos⁴⁹ y para la interpretación de la estereoselectividad en las reacciones de compuestos de estos mismos anillos⁵⁸. Cuando esto se combina con el uso de mapas diédricos⁵⁹, tenemos un método simple y poderoso para comparar las conformaciones de cualquier anillo.

La totalidad de los ángulos de torsión formados por los átomos de los anillos siempre definirá especialmente la conformación del anillo. Este procedimiento es particularmente efectivo cuando se aplica a sistemas de anillos grandes como es nuestro caso.

I.4.1.- Ángulos de torsión endocíclicos

Como ejemplo vamos a utilizar el ciclooctano no sustituido considerando solamente los ángulos de torsión endocíclicos, es decir, aquellos ángulos de torsión que implican a los átomos de carbono del anillo. Cuando este procedimiento se extienda a anillos heterocíclicos (nuestros complejos lo son) sólo se seguirá considerando los ángulos de torsión endocíclicos. Si se numeran los átomos como se muestra en la Figura 26 (a), entonces se define como ángulo de torsión (denominado **tor 1**, Figura 26 (b)) el formado entre los planos 8-1-2 y 1-2-3:

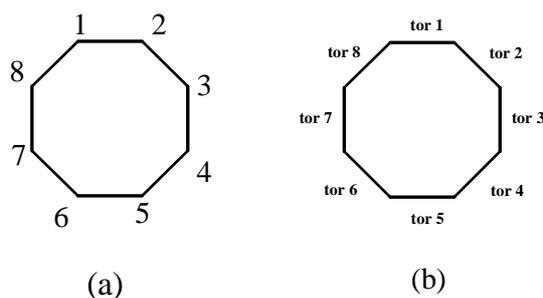


Figura 26.- Numeración de los átomos (a) y ángulos de torsión (b) en el ciclooctano

Los ángulos de torsión pueden obtenerse examinando un modelo molecular de ciclooctano, por datos de cristalografía de rayos X o por cálculos de mecánica molecular. Los átomos se numeran arbitrariamente en el sentido de las agujas del reloj, pero esto no afecta al análisis subsecuente.

El signo de los ángulos de torsión se determina mediante la proyección de Newman. La ambigüedad que surge en algunos casos para ángulos de torsión de $\pm 180^\circ$ no la vamos a desarrollar por no aparecer estos valores en nuestro estudio (el mayor valor es $\pm 119.9^\circ$ en la conformación *chair*).

I.4.2.- Mapas Polares de Ángulos de Torsión

Hay varios métodos para tabular o exponer ángulos de torsión. Una posibilidad es una simple tabla, similar a la anterior Tabla 3 que recoge los ángulos de torsión para las 10 conformaciones del ciclooctano. No obstante, cualquier simetría molecular no es obvia en esta tabulación y esto dificulta la comparación de conformaciones que estén numeradas desde diferentes puntos de partida.

Se ha observado que las representaciones gráficas de los signos de los ángulos de torsión contienen elementos de simetría de la molécula^{57,58,60}. En la Figura 27 se representan los signos de las conformaciones *chair* y *boat* del ciclohexano y en la Figura 28 los de la [3434] conformación I del ciclotetradecano. Los ángulos de torsión de estas tres conformaciones se recogen en la Tabla 4:

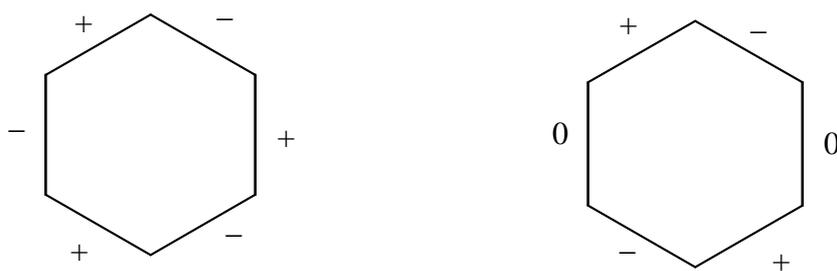


Figura 27 se representan los signos de las conformaciones *chair* y *boat* del ciclohexano

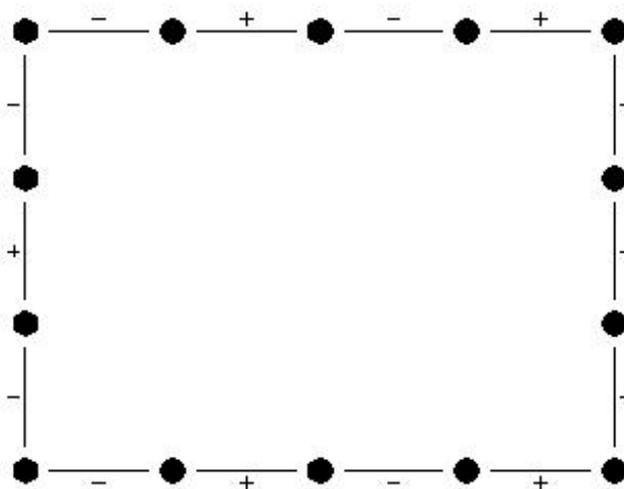


Figura 28.- Representación de signos de la configuración [3434] del ciclotetradecano

Ciclohexano						
	tor 1	tor 2	tor 3	tor 4	tor 5	tor 6
chair	60°	-60°	60°	-60°	60°	-60°
boat	60°	-60°	0°	60°	-60°	0°

tor 1	tor 2	tor 3	tor 4	tor 5	tor 6	tor 7
-180°	60°	60°	-180°	60°	60°	-180°
tor 8	tor 9	tor 10	tor 11	tor 12	tor 13	tor 14
180°	-60°	-60°	180°	-60°	-60°	180°

Tabla 4.- Ángulos de torsión de las conformaciones *Chair* y *Boat* del ciclohexano y de [3434] conformación I del ciclotetradecano

Generalmente, para anillos pequeños sólo se necesita el signo del ángulo de torsión para determinar inequívocamente la simetría de una conformación. Es obvio que esto no ocurre con anillos grandes, que tienen varios ángulos de torsión con el mismo signo pero muy diferentes magnitudes. Si añadimos los signos y la magnitud de los ángulos de torsión a los dibujos planares, nosotros vemos información adicional.

Aunque son informativas, estas informaciones son difíciles de trabajar (por ejemplo, para identificar el inicio de la serie de signos en las representaciones). Para evitar algunos problemas asociados a la añadidura de ángulos de torsión a las representaciones planares, dispondremos una exposición gráfica de ángulos de torsión *versus* enlaces. De esta manera se obtiene una gráfica lineal en la que los elementos de simetría no son obvios. Los modelos que surgen son muy sugestivos pero no permiten comparar dos conformaciones.

El primer uso de un mapa polar de ángulos de torsión fue realizado por Ogura *et al.* en su ilustración de la conformación de la oleanodomicina a partir de datos de rayos X⁵⁹. Este grupo también utilizó los mapas polares para describir la conformación de otros antibióticos macrocíclicos de 14 miembros⁶¹.

I.5.- Objetivos y estructuración del trabajo

Los objetivos a alcanzar en el presente Trabajo son:

1.- Utilizar la base de datos CSD para realizar una búsqueda sin restricciones de todos los compuestos que presenten anillos de ocho miembros con el fragmento N-C-S en disposición cabeza-cabeza y hacer una comparación con los datos obtenidos en disposición cabeza-cola **y con los nuevos compuestos N-C-S cabeza-cabeza aparecidos a partir del año 2006.**

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

2.- Discriminar aquellas estructuras que no son anillos de ocho miembros por:

- a) ser planas a causa de enlaces internos C-C, N-N, etc.
- b) ser perpendiculares debido a la presencia de enlaces metal-metal (se trataría entonces de dos anillos de cinco miembros).
- c) Otros motivos de tipo químico o estructural que desaconsejen incluirlas.

3.- Utilizar programas específicos que ayuden a realizar el estudio de las estructuras seleccionadas.

4.- Determinar qué metales y funciones orgánicas constituyen los anillos de 8 miembros.

5.- Establecer cuál es la configuración más probable que presenta cada estructura, midiendo, además, su grado de deformación respecto a los valores teóricos del ciclooctano.

6.- Medir las distancias metal-metal.

7.- Medir las distancias N-C y C-S tanto interiores como exteriores en el caso de presentarlas.

8.- Relacionar todos los criterios citados anteriormente y extraer, entre otras, conclusiones de tipo químico.

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.
- medir diversos parámetros de tipo químico y estructural.
- determinar la configuración de cada anillo de 8 miembros que más se aproxime a una de las 10 teóricamente posibles en el ciclooctano.
- relacionar los diversos criterios.
- **comparar resultados con los fragmentos estudiados hasta el año 2006.**
- obtener conclusiones.

II.- METODOLOGÍA Y CRITERIOS DE CLASIFICACIÓN

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. La versión 5.26 de noviembre de 2004 contiene información sobre 272066 compuestos. La siguiente actualización, de febrero de 2005, añadía 9.870 compuestos más. El número de compuestos casi se ha duplicado en estos años. Nuestra búsqueda se ha llevado a cabo con la versión 5.32, de noviembre de 2010, más una actualización, que contiene 525095 compuestos.

Ésta 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 1.8 (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 (versión 1.1.1 (2.4))*: 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, opcional, 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 compuesto pero preparado a diferente temperatura o con otros disolventes, estudiado con radiaciones diferentes, etc.

Los *refcode* de todas las conformaciones utilizadas se recogen en el Apéndice 1, los señalados en color rojo son los compuestos que han aparecido en la nueva búsqueda.

II.1.1.1.- Programa *ConQuest*

Seguidamente vamos a describir brevemente el empleo del programa *ConQuest 1.8 (1.13)* para formular un algoritmo de búsqueda que nos permita hallar los compuestos con conformaciones de ocho átomos para cualquier metal o metales que contengan el fragmento N-C-S en disposición cabeza-cabeza, como el del esquema de la Figura 29:

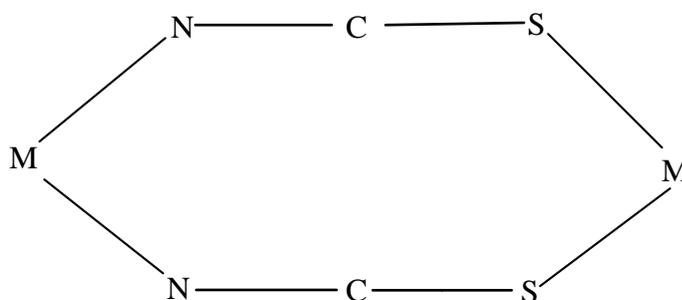


Figura 29

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.

2º) Introducción de los restantes elementos: N, C y S.

3º) Unión entre ellos hasta formar el esquema. En la pantalla del ordenador (Figura 30) aparecerá así:

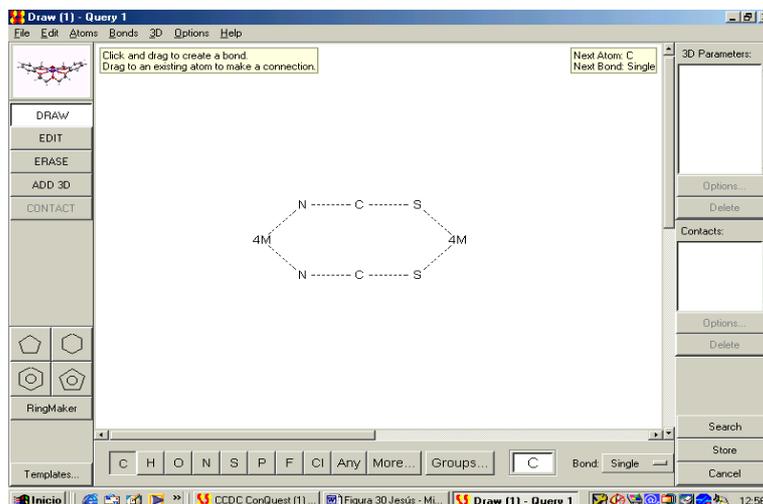


Figura 30

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 31.

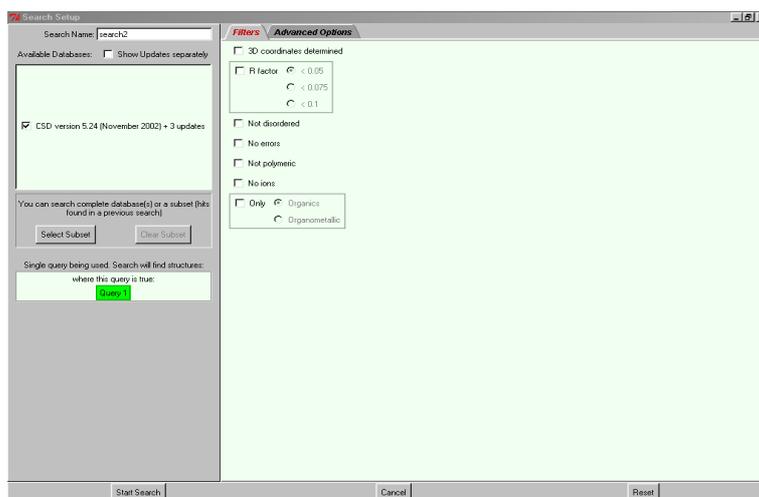


Figura 31

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 32:

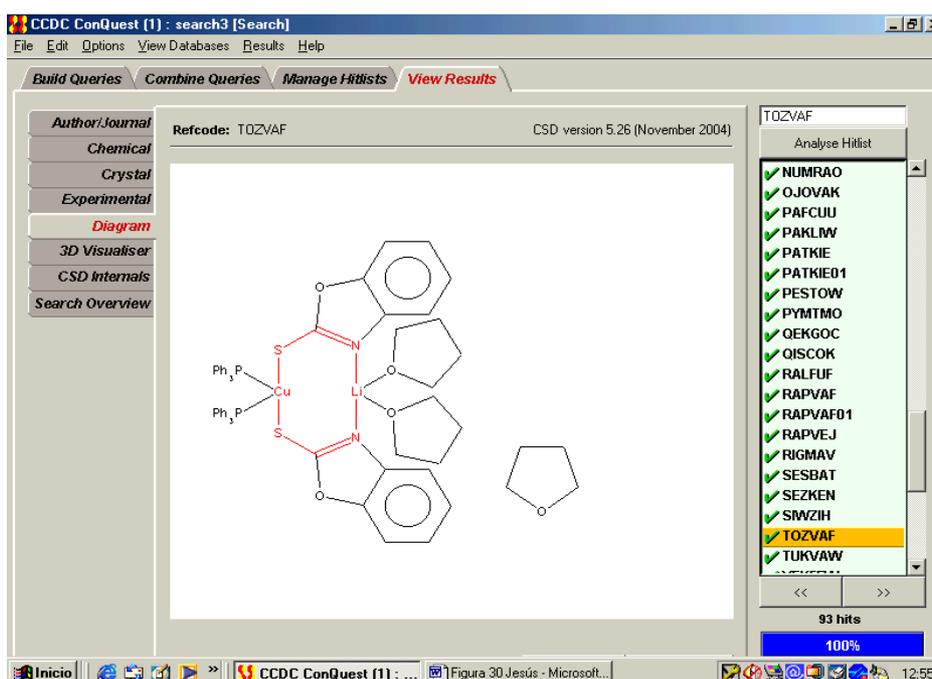


Figura 32

En el lado derecho de la pantalla aparecen los datos (*refcode*) como una vista secuencial ordenada alfabéticamente, recogiéndose a su pie el número total de estructuras seleccionadas (93 (172), en nuestro caso).

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. En la Figura 33 se observa la pantalla principal:

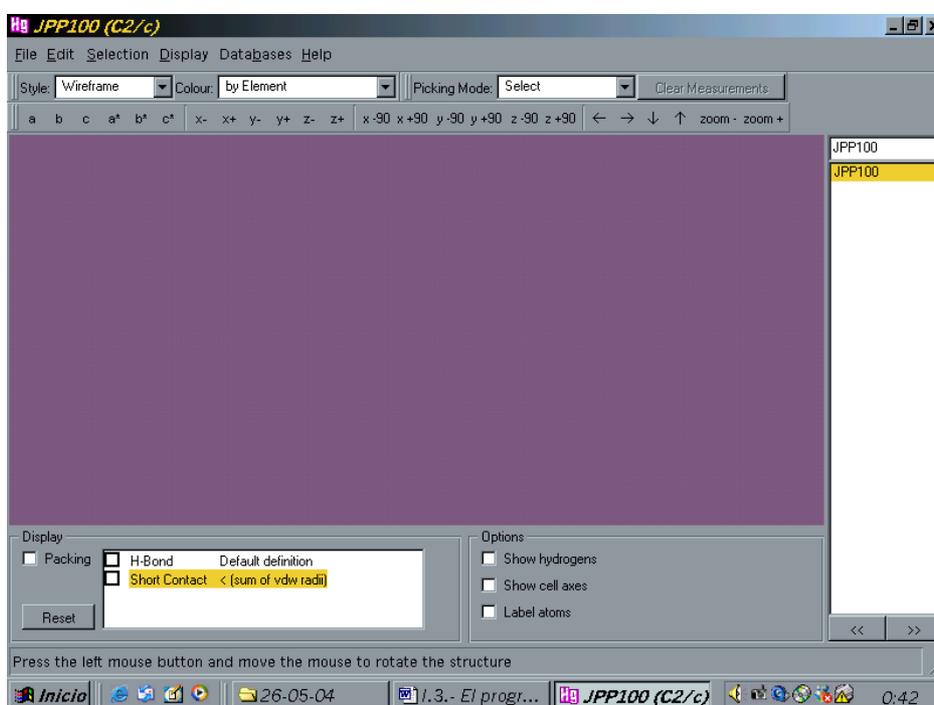


Figura 33.- Pantalla principal del programa *Mercury*

Entre las operaciones que se pueden realizar destacan las siguientes (Figuras 34 a 38):

- 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 Miller.

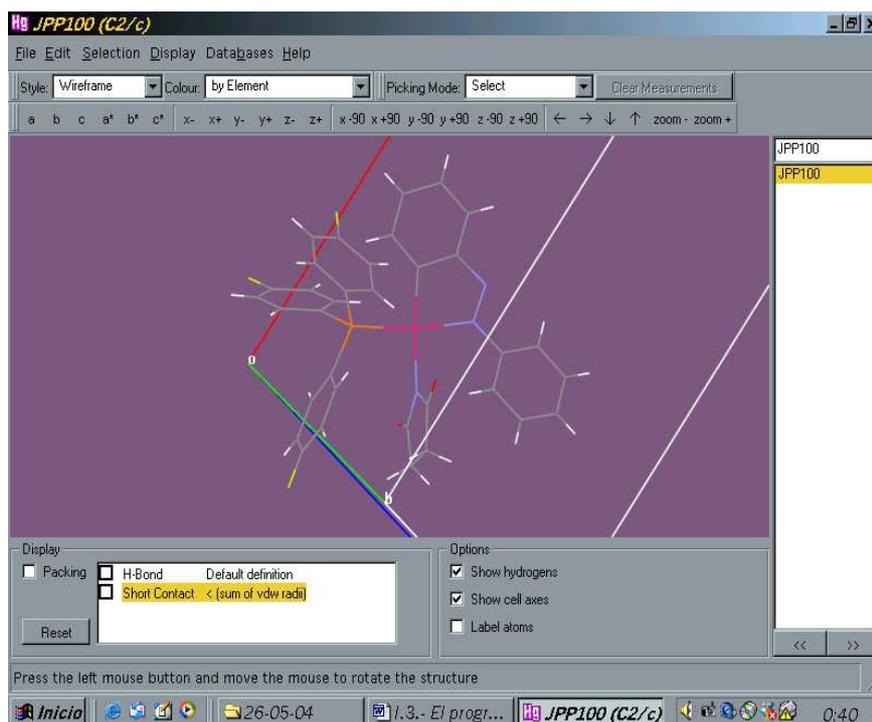


Figura 34

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

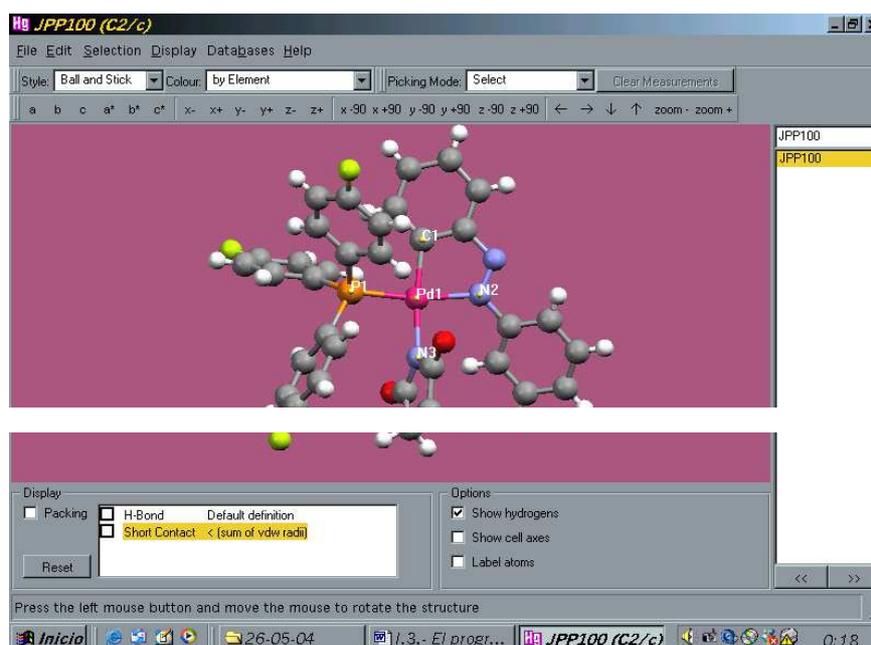


Figura 35

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

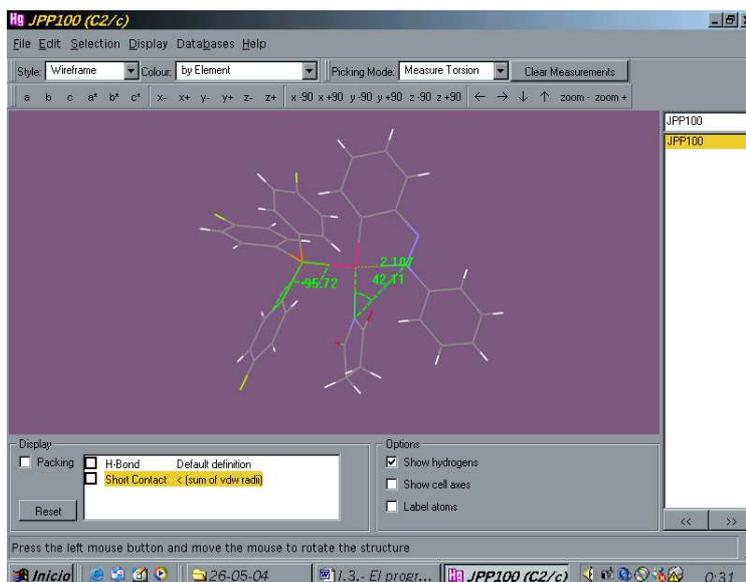


Figura 36

- 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.

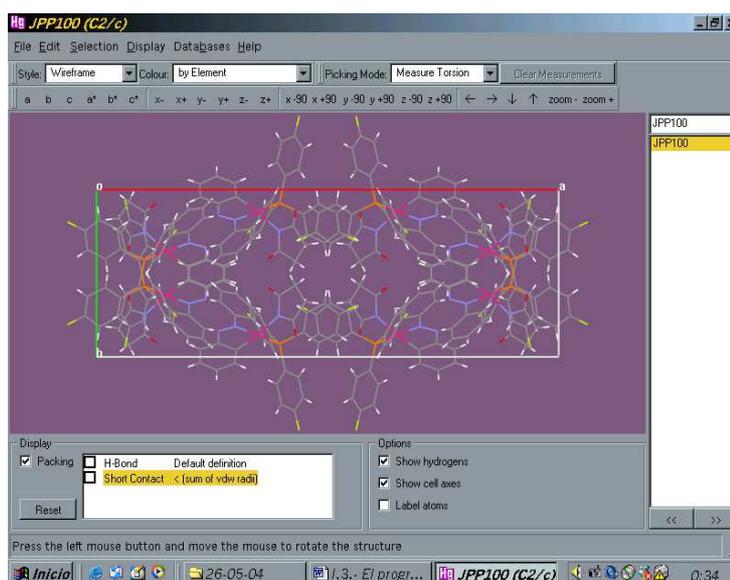


Figura 37

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

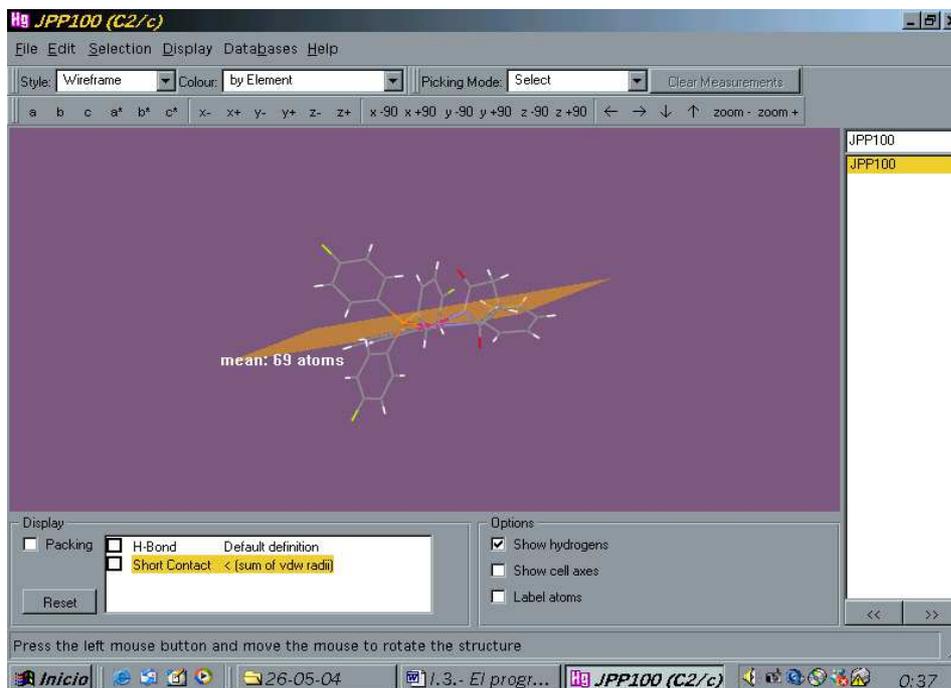


Figura 38

El programa no permite medir distancias y ángulos entre planos lo que supone un gran inconveniente a la hora de estudiar el empaquetamiento. Recientemente se ha publicado un trabajo⁶² sobre “nuevo software para búsquedas en la Cambridge Structural Database y visualización de las estructuras cristalinas” en las que se pone de manifiesto el futuro inmediato del programa Mercury. Desgraciadamente, no se prevé que sea posible realizar las citadas medidas.

Afortunadamente esta frase ha quedado superada y el programa ha ido mejorando más de lo previsto y su versión actual, la 2.4, permite medir el parámetro *rms* mediante el solapamiento de estructuras, realizar algunos cálculos de energía, etc. Las distancias entre planos se miden utilizando centroides.

II.1.2.- Programas específicos

II.1.2.1.- Método Bayesianos para la clasificación conformacional de anillos de ocho miembros.

Se han presentado dos métodos para la clasificación de anillos de ocho miembros basados en un análisis Bayesiano⁶⁴. 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 ciclooctano y, dada una secuencia empírica de ocho ángulos de torsión, calcula la probabilidad que corresponde a la estructura escogida para cada una de las diez 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 orgánicos⁶⁵ y metálicos⁶⁶ es un campo de búsqueda muy activo, siendo la CSD una poderosa herramienta en esta clase de estudios^{67,68}. 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 predecibles⁶⁹.

En 2001, Zimmer⁶⁶ ha revisado 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, 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 10 conformaciones canónicas del ciclooctano, como las descritas por Hendrickson⁵⁶, ya citado), u otro en el que no hay datos previos

acerca de las conformaciones “preferidas”. Asociadas a estos dos niveles de generalidad, se propusieron los dos métodos siguientes:

(1) Primer nivel de generalidad: las conformaciones “preferidas” las aporta el usuario: se realiza una clasificación individual de las estructuras observadas. Basándose en los ocho valores de los ángulos de torsión de una estructura, es posible, por medio de la regla de Bayer, 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. Así mismo, se pueden detectar similitudes entre conformaciones. A este método se le denominó “Método de Clasificación”.

(2) Segundo nivel de generalidad: se asume que no hay conocimiento previo de las conformaciones “preferidas”: se determina la inferencia Bayesiana acerca del número de conformaciones, las conformaciones mismas, su frecuencia de existencia así como las desviaciones estándar asociada 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.

Teoría:

El modelo:

Los ocho ángulos de torsión observados para una estructura dada obtenidos de la CSD se denotan por $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6, \tau_7, \tau_8)$. El modelo asumido para el mecanismo de generación de datos resulta de una realización de $\boldsymbol{\tau}$ que se construye en 3 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 $\mu(C) = (\mu_{C,1}, \mu_{C,2}, \mu_{C,3}, \mu_{C,4}, \mu_{C,5}, \mu_{C,6}, \mu_{C,7}, \mu_{C,8})$ sea la frecuencia de los ángulos de torsión asociados con la conformación C . Los valores observados de los ángulos de torsión en τ 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 8, con probabilidades iguales, y se construyó la secuencia.

$$\mu(C,v) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,((v) \bmod 8+1)}, \mu_{C,(v+1) \bmod 8+1}, \dots, \mu_{C,(v+6) \bmod 8+1})$$

donde, para cualquier entero j , $j \bmod 8$ denota j modulo 8, p.e., el resto de la división entera de j por 8. Además, la secuencia de los ángulos de torsión se puede leer en el sentido de las agujas del reloj o en sentido contrario. La versión de $\mu(C,v)$ en el sentido de las agujas del reloj se obtiene como

$$\mu(C,v) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v+6) \bmod 8+1}, \mu_{C,(v+5) \bmod 8+1}, \dots, \mu_{C,(v \bmod 8+1)}).$$

Ahora se introduce la variable d que toma valores 1 o -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

$$\mu(C,v,d) = (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v-1+d \times 1) \bmod 8+1}, \mu_{C,(v-1+d \times 2) \bmod 8+1}, \dots, \mu_{C,(v-1+d \times 7) \bmod 8+1}).$$

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

$$\mu(C,v,d,\delta) = \delta \times (\mu_{C,v}, \mu_{C,(v-1+d \times 1) \bmod 8+1}, \mu_{C,(v-1+d \times 2) \bmod 8+1}, \dots, \mu_{C,(v-1+d \times 7) \bmod 8+1}).$$

Como ejemplo, consideramos la conformación BC1, con ángulos de torsión 65.0, 44.7, -102.2, 65.0, -65.0, 102.2, -44.7, -65.0. Con índice $C = 1$ así tenemos

$$\mu(1,2,-1,1) = (44.7, 65.0, -65.0, -44.7, 102.2, -65.0, 65.0, -102.2).$$

- (3) Finalmente se considera que la secuencia observada se obtiene de $\mu(c,v,d,\delta)$ después de una perturbación añadida $\epsilon = (\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \epsilon_5, \epsilon_6, \epsilon_7, \epsilon_8)$ como

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

donde los componentes de la perturbación $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \epsilon_5, \epsilon_6, \epsilon_7, \epsilon_8$ se asume que son variables independientes gaussianas al azar con un valor medio cero y que el parámetro de varianza σ_c^2 puede depender de la conformación C.

Como conclusión de la relación entre $\tau, \mu(C,v, \delta)$ y ϵ , en el paso 3 se deduce que la densidad $(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6, \tau_7, \tau_8) \rightarrow f(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6, \tau_7, \tau_8)$ de la variable al azar τ es fácilmente computable: es una mezcla de leyes multivariadas

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

donde $f(\tau, c)$ son las mismas leyes multivariadas gaussianas

$$f(\tau, c) = \sum_{v=1, \dots, 8} \sum_{d=-1, 1} \sum_{\delta=-1, 1} f_G(\tau, \mu(c,v,d,\delta), \sigma_c^2),$$

$\tau \rightarrow f_G(\tau, \mu(c,v,d,\delta), \sigma_c^2)$ denotan la densidad de la ley gaussiana de ocho dimensiones con valor $\mu(c, v, d, \delta)$ 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 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 diez conformaciones canónicas del

ciclooctano: *Crown* (D_{4d}), *Twist boat* (*Sofa*) (S_4), *Boat boat* (D_{2d}), *Boat* (D_{2d}), *Twist chair chair* (D_2), *Chair chair* (C_{2v}), *Chair* (C_{2h}), *Twist chair* (C_{2h}), *Twist boat chair* (C_2) y *Boat chair* (C_s), ya citadas, cuyos datos de ángulos de torsión se recogen en tablas anteriores.

Utilizando la regla de Bayes se puede computar, dada una secuencia observada ($\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6, \tau_7, \tau_8$), la probabilidad que se genera a partir de la conformación C:

$$P(C=c | \tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6, \tau_7, \tau_8)) = p_c f(\tau, c) / (\sum_{c'=1, \dots, 10} p_{c'} f(\tau, c')).$$

La computación de estas probabilidades requiere la especificación de una distribución previa para ($p_1, p_2, p_3, p_4, p_5, p_6, p_7, p_8, p_9, p_{10}$) y para σ_c , la desviación estándar de las perturbaciones ϵ . En cuanto a las proporciones, se hace la elección $p_c = 1/10$, para $c = 1, \dots, 10$ lo cual indica que, *a priori*, no se favorece una conformación canónica particular. Para σ_c , si se elige $\sigma_c = 10^\circ$, a partir de la conocida propiedad de la ley de Gauss, el 95% de los valores tomados por las perturbaciones permanecerán entre -20 y 20° , lo cual parece un rango razonable de valores.

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

A continuación aplicamos el método de clasificación a un compuesto cualquiera, por ejemplo el de *refcode* TOZVAF, del cual se obtiene:

para $\sigma = 10$, *Boat boat*, probabilidad 1.00;

para $\sigma = 20$, *Boat boat*, probabilidad 0.84 y *Sofa*, probabilidad 0.16.

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 8 ángulos de torsión de cada una de ellas con las 82 combinaciones de los valores teóricos de las 10 conformaciones definidas para anillos de ocho miembros (ver Tabla 5).

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Crown	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5
CR1	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5
CR2	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Boat boat	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5
BB1	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5
BB2	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5
BB3	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5
BB4	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Sofa	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6
S1	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6
S2	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9
S3	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6
S4	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9
S5	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6
S6	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9
S7	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6
S8	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Boat	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0
B1	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0
B2	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5
B3	73.5	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0
B4	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Chair	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2
C1	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2
C2	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9
C3	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2
C4	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0
C5	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2
C6	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9
C7	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2
C8	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Twist chair	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3
TC1	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3
TC2	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3
TC3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3
TC4	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3
TC5	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3
TC6	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3
TC7	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3
TC8	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Twist chair chair	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4
TCC1	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4
TCC2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2
TCC3	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4
TCC4	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6
TCC5	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4
TCC6	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2
TCC7	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4
TCC8	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Chair chair	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0
CC1	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0
CC2	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0
CC3	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2
CC4	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2
CC5	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0
CC6	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0
CC7	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2
CC8	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Boat chair	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0
BC1	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0
BC2	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0
BC3	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7
BC4	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2
BC5	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0
BC6	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0
BC7	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2
BC8	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7
BC9	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0
BC10	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0
BC11	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7
BC12	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2
BC13	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0
BC14	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0
BC15	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2
BC16	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7
Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Twist boat chair	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2
TBC1	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2
TBC2	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0
TBC3	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2
TBC4	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9
TBC5	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8
TBC6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6
TBC7	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8
TBC8	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9
TBC9	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2
TBC10	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0
TBC11	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2
TBC12	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9
TBC13	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8
TBC14	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6
TBC15	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8
TBC16	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9

Tabla 5

Para ello, utilizando el programa *Excel*, se define una función f , que aplicaremos 82 veces a cada uno de los fragmentos que deseamos estudiar

desde

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

hasta

$$f(82) = [((\$Bn-\$B\$82)^2+(\$Cn-\$C\$82)^2+(\$Dn-\$D\$82)^2+(\$En-\$E\$82)^2+(\$Fn-\$F\$82)^2+(\$Gn-\$G\$82)^2+(\$Hn-\$H\$82)^2+(\$In-\$I\$82)^2)]^{0.5}$$

Sea, por ejemplo, la estructura de *refcode* TOZVAF cuyos 8 ángulos de torsión son **2.527 -82.519 55.101 55.101 -82.519 2.527 34.005 34.005**.

Al aplicar $f(1)$ estamos utilizando la primera serie de valores, definida en la Tabla 5 como CR1:

$$f(1) = [(87.5 - (2.527))^2 + (-87.5 - (-82.519))^2 + (87.5 - (55.101))^2 + (-87.5 - 55.101)^2 + (87.5 - (-82.519))^2 + (-87.5 - (2.527))^2 + (87.5 - 34.005)^2 + (-87.5 - 34.005)^2]^{0.5}$$

cuyo valor es 289.

Al aplicar $f(82)$ estamos utilizando la última serie de valores, definida como TBC16:

$$f(82) = [(93.2 - 2.527)^2 + (-88.0 - (-82.519))^2 + (93.2 - 55.101)^2 + (-51.9 - 55.101)^2 + (-44.8 - (-82.519))^2 + (115.6 - 2.527)^2 + (-44.8 - 34.005)^2 + (-51.9 - 34.005)^2]^{0.5}$$

cuyo valor es 188.

El menor valor es 93 y corresponde a la configuración denominada BB3. El segundo valor más bajo es 99 para la configuración S2, y así sucesivamente hasta los 82 casos posibles.

Por tanto, a esta estructura, podemos asignarle una conformación *boat boat*, coincidiendo plenamente con el método de Clasificación expuesto anteriormente, en la que, además, sabemos que los ángulos de torsión tienen el orden correspondiente a BB3, es decir, -52.5, -52.5, 52.5, 52.5, -52.5, -52.5, 52.5 y 52.5 (ver Tabla 5), 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 5º el valor calculado para ese intervalo varía entre 0 y $[8 \times (5 - 0)^2]^{0.5} = 14$.

De este modo los valores variarán de la forma en que se resume a continuación:

Variación de la deformación (º)	Intervalo de valores
0 → 5	0 → 14
5 → 10	15 → 28
10 → 15	29 → 42
15 → 20	43 → 56
20 → 25	57 → 71
25 → 30	72 → 85
30 → 35	86 → 99
35 → 40	100 → 113
40 → 45	114 → 127
45 → 50	128 → 141
50 → 55	142 → 156
55 → 60	157 → 170

Por tanto, el valor de 93 obtenido para la conformación objeto de nuestro estudio se encuentra en el intervalo 86 → 99 correspondiente a una deformación comprendida entre 30 → 35º (32º aproximadamente). En definitiva, la conformación más probable la denominaremos “BB3 deformada 32º”.

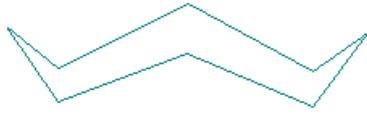
En el Apéndice 2 se recogen los resultados obtenidos al aplicar ambos programas.

II.1.3.- Las 10 conformaciones del ciclooctano generadas por el programa *Hyperchem*

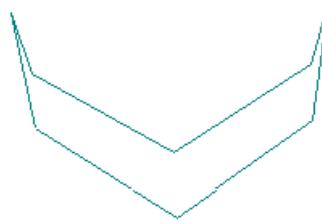
Las figuras correspondientes a las 10 conformaciones del ciclooctano (ver las tres páginas siguientes) se crearon mediante el software para modelado molecular *Hyperchem Release 7.01* (versión *Windows*)⁶³. Para ello, primero se construyó un anillo de ocho miembros mediante las opciones *default element* y *model build* desde el menú *BUILD*. Seguidamente, seleccionando los valores de los ángulos de torsión propuestos por Hendrickson⁵⁶, se crearon las distintas formas canónicas mediante la opción *constrain bond torsión* 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 10 archivos (con la extensión *hin*) de las conformaciones. Estos archivos sólo se pueden abrir desde *Hyperchem*. 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.

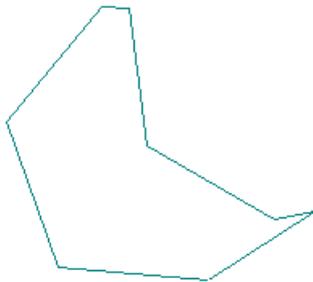
(*) *Hyperchem*TM ; *Hypercube Inc.* : 1115 NW 4th Street, Gainesville, Florida 32601, USA.



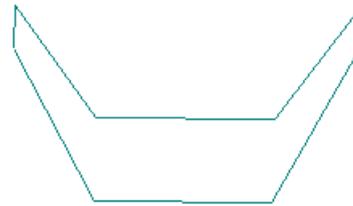
CROWN



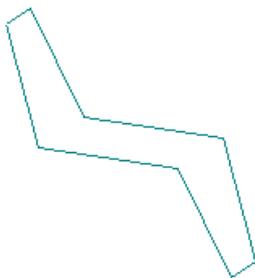
BOAT- BOAT



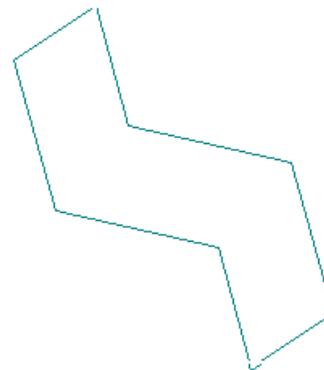
TWIST BOAT



(SOFA) BOAT



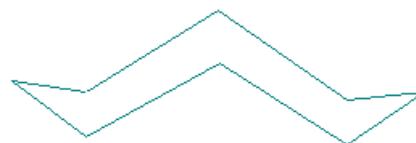
CHAIR



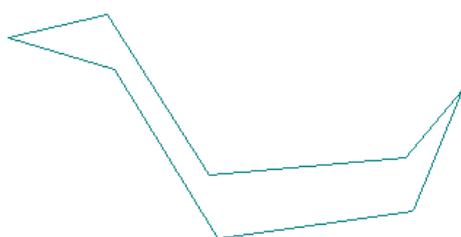
TWIST-CHAIR



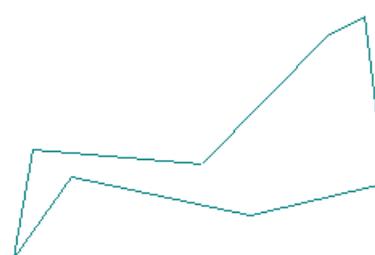
TWIST-CHAIR-CHAIR



CHAIR-CHAIR

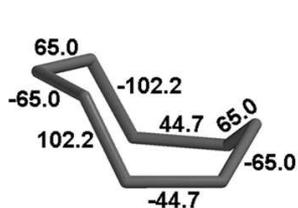
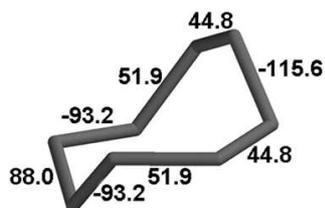
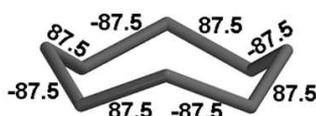
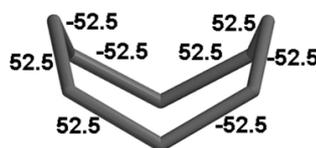
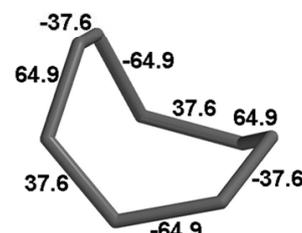
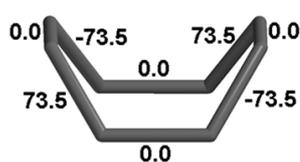
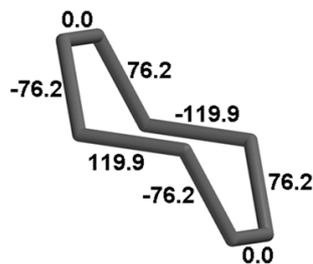
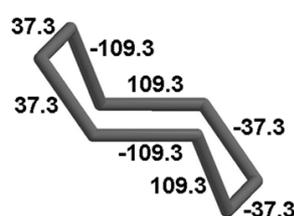


BOAT-CHAIR

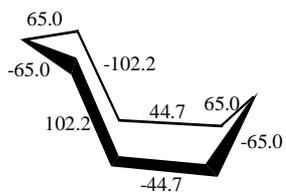


TWIST-BOAT-CHAIR

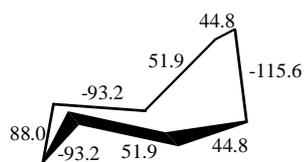
Este programa ha caído en desuso en el Área de Química Inorgánica de la UPCT y el dibujo de las estructuras de cualquier tipo de anillo se realiza desde hace varios años mediante el programa *Spartan*. En la siguiente figura se recogen las 10 conformaciones canónicas del ciclooctano dibujadas con este programa, en las que, además, se indican los valores de los ángulos de torsión y la simetría de cada conformación:

Boat-Chair (C_s)Twist-Boat-Chair (C_2)Crown (D_{4d})Chair-Chair (C_{2v})Twist-Chair-Chair (D_2)Boat-Boat (D_{2d})Twist-Boat (S_4)Boat (D_{2d})Chair (C_{2h})Twist-Chair (C_{2h})

En los últimos años también se han utilizado mucho, en PFCs y publicaciones del Área de Química Inorgánica, las figuras de los anillos dibujadas mediante el programa *Chem Drawn*:



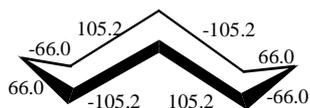
Boat-Chair (C_s)



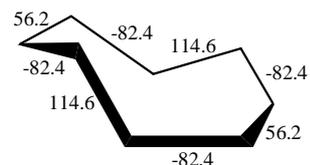
Twist-Boat-Chair (C_2)



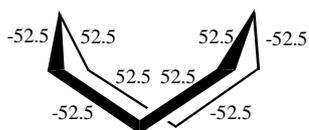
Crown (D_{4d})



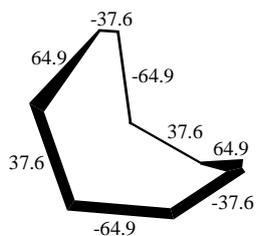
Chair-Chair (C_{2v})



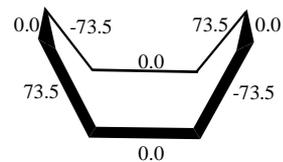
Twist-Chair-Chair (D_2)



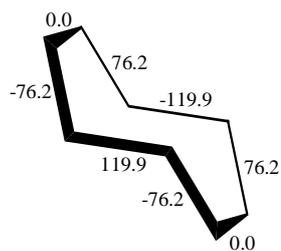
Boat-Boat (D_{2d})



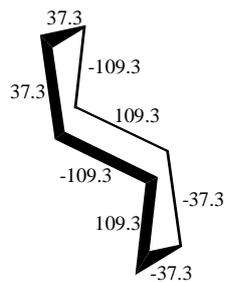
Twist-Boat (S_4)



Boat (D_{2d})



Chair (C_{2h})



Twist-Chair (C_{2h})

II.2.- Selección de las estructuras

El programa *ConQuest* permite obtener los datos estructurales de cada uno de los compuestos seleccionados según la búsqueda comentada anteriormente, presentándolos uno a uno de la forma que se recoge en la Figura 39 para el compuesto de *refcode* TOZVAF:

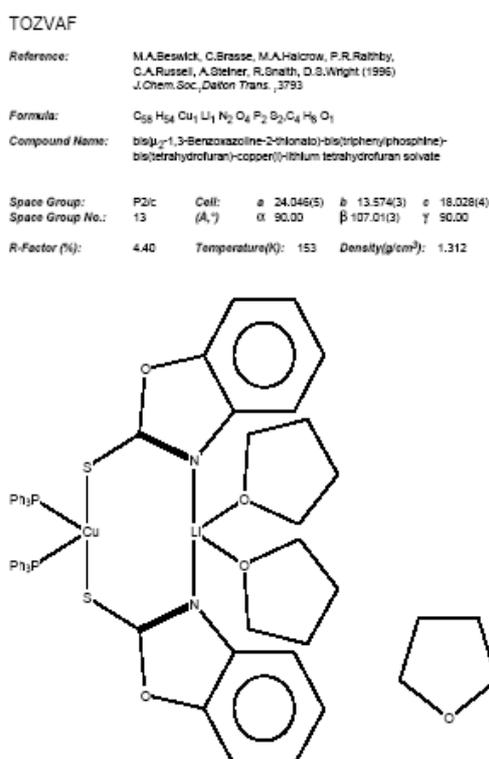


Figura 39

Los datos estructurales consisten en:

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

Con este programa y con el programa *Mercury* se han seleccionado visualmente, no por ordenador, los 93 (172) complejos dinucleares que presentan doble puente con el fragmento NCS en disposición cabeza-cabeza. En la Tabla 6 se representan los *refcode* de estos compuestos. **En rojo se muestran los compuestos**

hallados con la última actualización respecto a la búsqueda del año 2006: 79 nuevos compuestos.

<i>Refcode</i>			
AFUROI	FIQQOM	KUYMIB	RIGMAV
AFUTUQ	FISHIZ	LETLIF	RUQJUI
AKANEF	FOPJAV	MEKDUC	SANMOK
ASIPAT	FOPJEZ	MIKRAA	SESBAT
BAKHOL	FOWDIE	MOQWIZ	SEZKEN
BAKHUR	GALXAS	MRIMCU	SIWZIH
BAZCIO	GOBDUW	NAHXEZ	SUJMUG
BUYDAB	GOBFEI	NAXWOZ	SUJNAN
CATNIU	GOBFEI01	NAXWUF	SUJNER
CATNIU10	GODLOB	NILKAV	SUJNIV
CIPKAN	GOXGUV	NIRJED	TAZYAV
CUPGUQ	IFAFOL	NOKPUY	TEFJUK
CUPHIF	IQATUQ	NOKQAF	TIMXOD
CUPHOL	IQAVAY	NOQYOH	TOXZOC
CUPHUR	IPAHEM	NUMRAO	TOZVAF
CUSHUT	ISUMUF	NUSRUP	TUHLAK
DEBKIE	ISUNAM	NUVYEJ	TUKVAW
DEBQUX	IXUFOW	OJOVAK	TUHLEO
DEBTOU	IXUGAJ	PAFCUU	TUHLOY
DETQIC	IXUGEN	PAGTAT	TUHLUE
DETQOI	IXUFIQ	PAGTEX	TUHMAL
DIFROA	JADYOC	PAGTOH	TUYZOD
DUFFIU	JAMPAO	PAKLIW	UNAVAH
EHAPUY	JAVPAX	PATKIE	VEKFEW
EJAKOP	JESKOH	PATKIE01	VOMBIJ
EJAKUV	JEYXER	PEMPED	VUYZEU
EMIZINK	JIRQOR	PESTOW	WALHUL
ELEXAV	JONHUP	PEYLIP	WETRIW
ELOTEF	JOSCOJ	PIBFIQ	WEXVIE
FABVUB	JUCVEI	PILZOA	WIVTIE
FANFUV	KALPAP	PONLENK	XUDKOX
FAWJIW	KAMROF	PONLIO	YERZEA
FAWJOC	KAXZUE	PYMTMO	YERZOK
FAWJUI	KAZMEE	QEKFES	YOFYIB
FEGFEC	KEWVEN	QEKGOC	YOLVEB
FEJZEZ	KEWVIR	QISCOK	YUCDUV
FELBON	KEWVOX	QIXBOP	YUMCIS
FELBON10	KUBMAW	QIXBUV	ZIFLAB
FETCAI	KUBMEA	RALFUF	ZIFLAB01
FETCEM	KUDJAV	RAPVAF	ZONWEE
FIQQAY	KUJFAX	RAPVAF01	ZONWEE01
FIQQEC	KUNZIC	RAPVAF02	ZUDYIG
FIQQIG	KUNZIC10	RAPVEJ	ZUDYOM

Tabla 6.- *Refcode* de los 172 compuestos seleccionados

II.3.- Criterios de clasificación

Vamos a considerar diversos criterios de clasificación de los compuestos seleccionados tales como los metales que aparecen en las conformaciones, funciones químicas y conectividad.

Los resultados obtenidos se compararán con los del estudio desarrollado en el Área de Química Inorgánica de la UPCT con el fragmento NCS, en disposición cabeza-cola y, además, se estudiarán los cambios surgidos al duplicar el número de compuestos con la actual búsqueda respecto a la de noviembre de 2004.

II.3.1.- METALES

Cabe destacar la gran variedad de metales presentes en las conformaciones: 28 (35), han aparecido 7 nuevos metales, de casi todos los grupos de la Tabla Periódica (ver tablas adjuntas), pertenecientes a las tres series de transición y lantánidos. Sigue sin haber actínidos.

Los nuevos metales son: litio, calcio, titanio, wolframio, manganeso, indio y praseodimio.

La distribución es similar a la obtenida para los compuestos con el fragmento NCS en disposición cabeza-cola en la que había un total de 34 metales diferentes en la búsqueda del año 2004. Las presencias/ausencias más importantes son:

- a) Presencia de potasio, cesio, cobalto y boro. A los que hay que sumar: calcio, titanio, wolframio, indio y praseodimio.
- b) Ausencia de litio, magnesio, ytrio, manganeso, osmio, oro, zinc, galio y los lantánidos neodimio y erbio.

En los compuestos NCS cabeza-cabeza observamos que hay una cantidad de complejos heterodinucleares muy superior a la disposición cabeza-cola: 30 frente a 4, respectivamente. En la nueva búsqueda han aparecido 26 nuevos compuestos, lo que hace un total de 56.

En la **Tabla 7** se recogen **todos** estos compuestos y su *refcode*:

PARES DE METALES DIFERENTES	REFCODE	PARES DE METALES DIFERENTES	REFCODE	PARES DE METALES DIFERENTES	REFCODE
Pt-Pd	AFUTUQ OJOVAK WIVTIE	Ag-Cd	KUYMIB ZONWEE ZONWEE01	K-Hg	GOBDUW JEYXERÇ PEYLIP VUYZEU
Pt-Cr	IXUFIQ IXOFOW IXUGAJ IXUGEN KEWVEN KEWVIR	Ag-Co	JUCVEI	K-Cd	RAPVAF02
Pt-Ni	PATKIE PATKIE01	Ag-Ni	NILKAL	K-In	ELOTEF
Pt-Co	FEJZEZ	Ag-Pr	ISUMUF ISUNAM	V-Na	KUNZIC KUNZIC10
Pt-Ru	RIGMAV	Cu-Ni	YUCDUV	Cd-Cs	ZIFLAB ZIFLAB01
Pt-V	KEWVOX	Cu-Li	TOZVAF	Cd-Hg	TUXZOC
Pt-Ca	JOSCOJ	Cu-Ba	RALFUF	Ti-Rh	GOXGUV
Pt-Rh	KUDJAV PAFCUU	Cu-W	DUFFIU	Sn-Eu	NOQYOH
Pd-Sn	YOLVEB IQATUQ IQAVAY	Cu-Hg	BUYDAB ELEXAV	Na-Hg	NUSRUP
Ag-Fe	DETQOI DETQIC PAGTAT PAGTEX PAGTOH TAZYAV	K-Bi	NAHXEZ WETRIW		

Tabla 7. - Compuestos heterodinucleares

En la página siguiente se recogen los metales presentes en los fragmentos NCS cabeza-cabeza, **en fondo azul los metales comunes a las dos búsquedas y en color rojo los metales que han aparecido nuevos en nuestra segunda búsqueda.**

1																	18	
H																	He	
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
3	4	5	6	7	8	9	10	11	12									
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Eh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq					
* Lantánidos		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
# Actínidos		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

En la Tabla 8 se especifican todos los metales, el número de compuestos que los presentan y el porcentaje de presencia sobre el total de 93 (172) compuestos. Casi la tercera parte son heterodinucleares: 30 (56) compuestos (32.26%, 32.56%). Los 63 (116) compuestos homodinucleares son de platino (25.80%, 18.97%), cadmio (25.80%, 25.00%), paladio (9.67%, 14.66%), molibdeno (6.45%, 2.59%), rodio (4.84%, 2.59%), cobre (4.84%, 7.76%), mercurio (3.22%, 1.72%), renio (3.22%, 6.03%), cobalto (1.61%), plata (1.61%, 5.17%), rutenio (1.61%), aluminio (1.61%), níquel (1.61%, 5.17%), samario (1.61%), gadolinio (1.61%), hierro (1.61%) y plomo (1.61%, 1.72%), más manganeso (1.72%), iridio, y titanio (0.86% cada uno).

En 2006 el metal más abundante era el platino seguido del cadmio, ahora es al revés, el cadmio seguido del platino. Los cambios, en general, son poco significativos.

Mientras que la mayoría de los compuestos con el fragmento NCS en disposición cabeza-cola eran de cobre (26.30%) y cadmio (12.99%), los nuestros son de platino (25.80%) y cadmio (25.80%). Los compuestos de cobre han ascendido al 7.76% y los de cadmio se mantienen en el entorno del 25%.

Metales	2006		2012	
	Número de compuestos	% de compuestos	Número de compuestos	% de compuestos
Platino	16	25.80	22	18.97
Cadmio	16	25.80	29	25.00
Paladio	6	9.67	17	14.66
Molibdeno	4	6.45	3	2.59
Rodio	3	4.84	3	2.59
Cobre	3	4.84	9	7.76
Mercurio	2	3.22	2	1.72
Renio	2	3.22	7	6.03
Hierro	1	1.61	1	0.86
Cobalto	1	1.61	1	0.86
Níquel	1	1.61	6	5.17
Rutenio	1	1.61	1	0.86
Plata	1	1.61	6	5.17
Iridio	1	1.61	1	0.86
Aluminio	1	1.61	1	0.86
Plomo	1	1.61	2	1.72
Samario	1	1.61	1	0.86
Gadolinio	1	1.61	1	0.86
Titanio	0	0.00	1	0.86
Manganeso	0	0.00	2	1.72

Tabla 8.- Metales, número de compuestos que presentan cada metal y porcentaje

II.3.2.- Funciones químicas.

Esta clasificación alberga mayor utilidad e interés que la precedente (la cual era de naturaleza informativa), ya que con ella nos va a ser posible realizar una predicción geométrica de algunas estructuras.

Es conveniente explicar la confusión encontrada a la hora de nombrar las funciones tiocianato e isotiocianato, que presentan compuestos aparentemente similares nombrados de forma diferente (ver Tabla 9). Por ejemplo los compuestos de *refcode* BAKHUR y AKANEF nombrados como tiocianatos están representados con estructuras diferentes, y lo mismo ocurre con los compuestos DETQIC y FEGFEC nombrados como isotiocianatos. Además tenemos un quinto caso: compuestos nombrados como tiocianato-isotiocianato (NUMRAO). Tras encontrar estas contradicciones la opción es clasificar a cada compuesto según el nombre asignado por el autor.

<p>TIOCIANATO</p> <p><i>BAKHUR</i></p>	<p>ISOTIOCIANATO</p> <p><i>DETQIC</i></p>
<p><i>AKANEF</i></p>	<p><i>FEGFEC</i></p>
<p>TIOCIANATO-ISOTIOCIANATO</p> <p><i>NUMRAO</i></p>	

Tabla 9

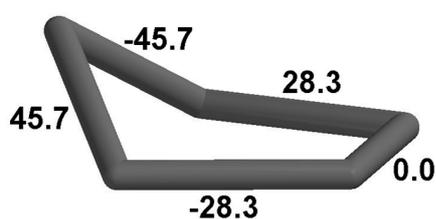
El resultado obtenido muestra una gran variedad de funciones que detallamos a continuación y cuyos datos se recogen en las Tablas 10 a 20, ambas inclusive. También hacemos un comentario acerca de las funciones químicas. Para ello nos basamos en la Tabla 21, que resume las funciones encontradas, señalando sus nombres, número de compuestos que presenta cada una y su porcentaje respecto del total.

Las más abundantes son la función piridina-2-tiolato con 26 compuestos (27.95%) y la función tiocianato con 25 (26.88%). **Esta situación se ha invertido y ahora prevalece la función tiocianato con 47 compuestos (27.33%) sobre la piridina-2-tiolato (32 compuestos; 18.60%).** Le sigue a mayor distancia la pirimidina-2-tiolato con 7 (7.52%), oxamidato (7.52%), mercaptobenzotiazolato con 7 (7.52%) e isocianato con 6 (6.45%). Otras son imidazolato con 3 (3.22%) y lactamato con 2 (2.15%). El resto de compuestos son 10 con un total del 10.75%. **La función mercaptobenzotiazolato asciende al tercer puesto con 17 compuestos (9.88%),**

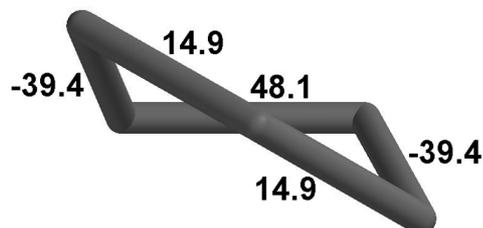
seguida de isocianato con 11 (6.40%), pirimidina-2-tiolato y imidazolato con 9 cada uno (5.23%), oxamidato con 8 (4.65%) y lactamato con 5 (2.91%). El resto de compuestos son 34 con un total de 19.67 %.

La función oxamidato presenta un enlace $C(sp^2)-C(sp^2)$ que hace que el anillo de ocho miembros se convierta en dos de cinco. Esta función también aparecía en los compuestos en disposición cabeza-cola (1%), donde las más abundantes eran la función tiocianato con el 37.34% y piridina-2-tiolato con el 20.13%.

En los años transcurridos entre los dos PFC, en el Área de Química Inorgánica se han desarrollado métodos de estudio de los anillos intermedios (5 a 9 miembros): ángulos de torsión, cálculo de *rms*, etc. Desgraciadamente, en el caso de los anillos de 5 miembros el estudio no aporta gran información al no ser concluyente en sus resultados ya que no es fácil discernir entre las dos únicas estructuras canónicas que presenta el ciclopentano: *envelope* y *half-chair*.



Envelope (C_2)



Half-Chair (C_2)

En las tablas siguientes los *refcode* de los nuevos compuestos están de color rojo.

TIOCIANATO					
N=C=S (1)			N≡C—S (2)		
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
AKANEF	Tiocianato (2)	JEYXER	Tiocianato(1)	SUJMUG	Tiocianato (1)
BAKHOL	Tiocianato (1)	JUCVEI	Tiocianato (1)	SUJNAN	Tiocianato (1)
BAKHUR	Tiocianato (1)	KAMROF	Tiocianato (2)	SUJNER	Tiocianato (1)
BAZCIO*	Tiocianato (1)	KUBMAW	Tiocianato (1)	SUJNIV	Tiocianato (1)
BUYDAB	Tiocianato (1)	KUYMIB	Tiocianato (2)	TAZYAV	Tiocianato (1)
DUFFIU	Tiocianato (2)	NAHXEZ	Tiocianato (2)	TIMXOD	Tiocianato (1)
ELEXAV	Tiocianato (2)	NUMRAO*	Tiocianato (1)	TUKVAW	Tiocianato (2)
ELOTEF	Tiocianato (2)	NUSRUP	Tiocianato (1)	TUXZOC	Tiocianato (1)
GOBDUW	Tiocianato (2)	PEMPED	Tiocianato (2)	VOMBIJ	Tiocianato (2)
GOBFEI	Tiocianato (2)	PEYLIP	Tiocianato (2)	VUYZEU	Tiocianato (2)
GOBFEI01	Tiocianato (2)	RALFUF	Tiocianato (2)	YUMCIS	Tiocianato (2)
IFAFOL	Tiocianato (2)	RAPVAF	Tiocianato (1)	ZIFLAB01	Tiocianato (1)
IPAHEM	Tiocianato (1)	RAPVAF01	Tiocianato (1)	ZONWEE01	Tiocianato (2)
ISUMUF	Tiocianato (2)	RAPVEJ	Tiocianato (1)	ZONWEE	Tiocianato (2)
ISUNAM	Tiocianato (2)	SESBAT	Tiocianato (1)	KUBMEA	Tiocianato (1)
JAVPAX	Tiocianato(1)	SIWZIH	Tiocianato (1)		

*compuestos nombrados por el autor como tiocianato-isotiocianato

Tabla 10

Isotiocianato					
N=C=S (1)			N≡C—S (2)		
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
DETQIC	Isotiocianato (1)	PAGTAT	Isotiocianato (2)	WAJHUL	Isotiocianato (2)
DETQOI	Isotiocianato (1)	PAGTEX	Isotiocianato (2)	WETRIW*	Isotiocianato (1)
FEGFEC	Isotiocianato (2)	PAGTOH	Isotiocianato (2)	ZIFLAB	Isotiocianato (2)
LETLIF	Isotiocianato (2)	RAPVAF02	Isotiocianato (2)		

*compuestos nombrados por el autor como tiocianato-isotiocianato

TABLA 11

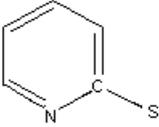
PIRIDINA-2-TIOLATO					
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
CATNIU	Piridina-2-tiolato	FIQQOM	Piridina-2-tiolato	KUNZIC10	Piridina-2-tiolato
CATNIU01	Piridina-2-tiolato	FOPJEZ	Piridina-2-tiolato	NOKPUY	Piridina-2-tiolato
CUPHUR	Piridina-2-tiolato	FOPJAV	Piridina-2-tiolato	NOKQAF	Piridina-2-tiolato
DEBQUX	Piridina-2-tiolato	GOXGUV	Piridina-2-tiolato	NOQYOH	Piridina-2-tiolato
EHAPUY	Piridina-2-tiolato	JAMPAO	Piridina-2-tiolato	PATKIE	Piridina-2-tiolato
FEJZEZ	Piridina-2-tiolato	JONHUP	Piridina-2-tiolato	PATKIE01	Piridina-2-tiolato
FELBON	Piridina-2-tiolato	KAXZUE	Piridina-2-tiolato	QISCOK	Piridina-2-tiolato
FELBON10	Piridina-2-tiolato	KEWVEN	Piridina-2-tiolato	SEZKEN	Piridina-2-tiolato
FIQQAY	Piridina-2-tiolato	KEWVIR	Piridina-2-tiolato	YERZEA	Piridina-2-tiolato
FIQQEC	Piridina-2-tiolato	KEWVOX	Piridina-2-tiolato	YOFYIB	Piridina-2-tiolato
FIQQIG	Piridina-2-tiolato	KUNZIV	Piridina-2-tiolato		

Tabla 12

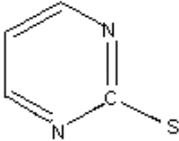
PIRIMIDINA-2-TIOLATO					
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
CUSHUT	Pirimidina-2-tiolato	FAWJIW	Pirimidina-2-tiolato	NUVYEJ	Pirimidina-2-tiolato
EJAKOP	Pirimidina-2-tiolato	FAWJUI	Pirimidina-2-tiolato	PYMTMO	dimetilpirimidina-2-tiolato
EJAKUV	Pirimidina-2-tiolato	NILKAV	Pirimidina-2-tiolato	JADYOC	Pirimidina-2-tiolato

Tabla 13

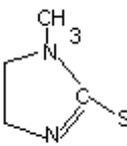
-IMIDAZOLATO					
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
IQATUQ	Metilimidazolato	QEKGOC	Tioimidazolato	SANMOK	Mercaptobenzimidazolato
IQAVAY	Metilimidazolato	MRIMCU	2-mercaptoimidazol	TEFJUK	Tioimidazolato
MOQWIZ	1-mercaptoimidazol	RUQUJ	Metilimidazolato	YERZOK	Metilimidazolato

Tabla 14

LACTAMATO					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
FETCAI	Tiolactamato	IXUFOW	Lactamato	IXUGEN	Lactamato
FETCEM	Lactamato	IXUGAJ	Lactamato		

Tabla 15

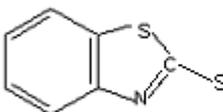
mercaptoBENZOTIAZOLATO					
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
AFUROI	Benzotiazolato	GALXAS	Benzotiazolato	PILZOA	Benzotiazolato
ASIPAT	Aminobenzotiazolato	GODLOB	Benzotiazolato	PONLEK	Benzotiazolato
CUPGUQ	Benzotiazolato	JIRQOR	Benzotiazolato	PONLIO	Benzotiazolato
CUPHIF	Benzotiazolato	MIKRAA	Benzotiazolato	QIXBOP	Benzotiazolato
DEBKIE	Benzotiazolato	PAKLIW	Mercaptobenzotiazolato	QIXBUV	Benzotiazolato
FOWDIE	Benzotiazolato	PAFCUU	Benzotiazolato		

Tabla 16

OXAMIDATO					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
AFUTUQ	Ditio-oxamidato	KUDJAV	Ditio-oxamidato	WIVTIE	Ditio-oxamidato
FANFUV	Ditio-oxamidato	OJOVAK	Ditio-oxamidato	YUCDUV	Ditio-oxamidato
JEZKOH	Ditio-oxamidato	RIGMAV	Diamidato		

Tabla 17

RESTO DE COMPUESTOS					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
IXUFIQ	Mercaptopiridina	KALPAP	2-Piridilsulfanil	WEXVIE	Naphthyridin-2-tiona
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
ZUDYIG	Dietilaminotiocarbonil	DEBTOU	Tetrazol-5-Tiolato	FABVUB	Tetrazol-5-Tiolato
ZUDYOM	Dietilaminotiocarbonil	QEKFES	Tetrazol-5-Tiolato	EMIZIK	Trizol-3-Tiolato
KAZMEE	Metimazol	NIRJED	Tetrazol-5-Tiolato	UNAVAH	Trizol-3-Tiolato
FAWJOC	2-Tiolato	FISHIZ	Pirimidiniltiometil		
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
JOSCOJ	Mercaptobenzooazol	PESTOW	Mercaptobenzooazol	TOZVAF	Benzoxazol
CUPHOL	Benzoxazol	MEKDUC	Oxadiazolato	PIBFIQ	Oxadiazolato

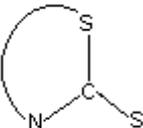
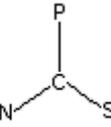
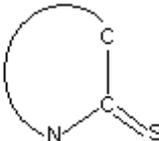
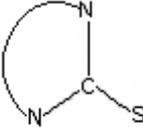
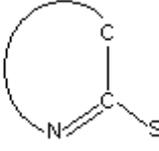
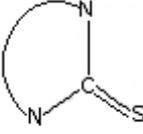
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
VEKFEW	Thiazolina-2-tionato	NAXWOZ	Thiothyminil	NAXWUF	Thiothyminil
KUJFAX	Thiazolina-2-tionato				
					
	REFCODE	FUNCIÓN			
	CIPKAN	Difenilfosfino			
					
	REFCODE	FUNCIÓN			
	TUYZOD	Benzisotiazol-3-Tiolato			
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN
TUHLAK	Butylimidazolato-2-tiolato	TUHLOY	Butylimidazolato-2-tiolato	TUHMAL	Butylimidazolato-2-tiolato
TUHLEO	Butylimidazolato-2-tiolato	TUHLUE	Butylimidazolato-2-tiolato		
					
REFCODE	FUNCIÓN	REFCODE	FUNCIÓN		
XUDKOX	Tiosaccharinato	DIFROA	Tiosaccharinato		
					
		REFCODE	FUNCIÓN		
		YOLVEB	Metimazol		

Tabla 18

En la Tabla 19 se comparan los porcentajes de cada grupo funcional en ambas búsquedas. Las columnas con los números en rojo son los resultados del año 2012.

FUNCIÓN	PFC 2006		TFG 2012	
	nº compuestos	% sobre el total	nº compuestos	% sobre el total
PIRIDINA-2-TIOLATO	26	27.96	32	18.60
TIOCIANATO	25	26,88	47	27.33
ISOTIOCIANATO	6	6.45	11	6.40
PIRIMIDINA-2-TIOLATO	7	7.52	9	5.23
MERCAPTOBENZOTIAZ-OLATO	7	7.52	17	9.88
IMIDAZOLATO	3	3.22	9	5.23
LACTAMATO	2	2.15	5	2.91
OXAMIDATO	7	7.52	8	4.65
RESTO DE COMPUESTOS	10	10.75	34	19.77
TOTAL	93	99.97	172	100

Tabla 19.- Porcentajes de cada grupo funcional

Las diferencias en los resultados de estas dos búsquedas ya se han comentado anteriormente.

La siguiente tabla refleja el crecimiento de compuestos según su función al aumentar aproximadamente al doble en número de compuestos desde la búsqueda del 2006 a la actualización del 2012.

FUNCIÓN	PFC 2006	TFG 2012	Diferencia	Crecimiento Aproximado
	nº compuestos	nº compuestos		
RESTO DE COMPUESTOS	10	34	24	Triple
IMIDAZOLATO	3	9	6	Triple
MERCAPTOBENZOTIAZ-OLATO	7	17	10	Doble
LACTAMATO	2	5	3	Doble
TIOCIANATO	25	47	22	Doble
ISOTIOCIANATO	6	11	5	Doble
PIRIDINA-2-TIOLATO	26	32	6	Igual
OXAMIDATO	7	8	1	Igual
PIRIMIDINA-2-TIOLATO	7	9	2	Igual

Tabla 20.- Crecimiento compuestos según su función

II.3.3.- Conectividad

El estudio que vamos a realizar se centra en las configuraciones de los anillos de ocho miembros de los compuestos seleccionados, pero debido a la presencia de enlaces dentro del anillo en algunos de ellos, nos vemos en la necesidad de discriminar cuáles pueden ser objeto o no del mismo.

Para ello se revisarán, una por una, las fórmulas desarrolladas con las que hemos trabajado desde el principio, agrupándolas según los enlaces que presenten en los anillos y confirmando las estructuras de los compuestos con la ayuda del programa *Mercury*.

En el estudio de funciones químicas realizado en el apartado anterior ya vimos que había un grupo de compuestos, el de los ditio-oxamidatos, que presenta un enlace interno carbono-carbono, ya comentado. En total son siete compuestos con *refcode* AFUTUQ, FANFUV, JEZKOH, OJOVAK, RIGMAV, WIVTIE, YUCDUV. **Ahora son ocho, uno más: KUDJAV.**

Otro enlace interno es el que presentan los compuestos cuyas funciones son piridina-2-tiolato, JUNHUP, KUNZIC y NOQYOH y dietilaminotiocarbonil, ZUDYIG y ZUDYOM. Se trata de los enlaces internos S–M y N–M como se muestra en la Figura 40:

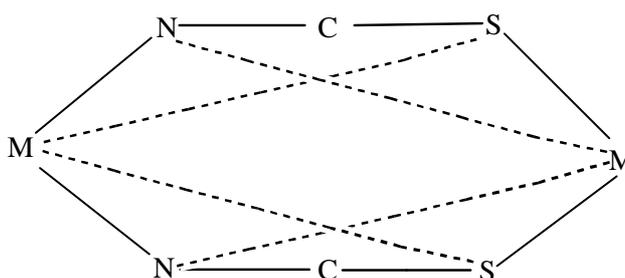


Figura 40

El enlace interno S–M, presente en 56 de los 477 fragmentos NCS cabeza-cola, sólo aparece en 5 (16) de los 93 (172) fragmentos NCS cabeza-cabeza. Además hay dos compuestos, QISCOK y NIRJED, que presentan un puente de azufre entre los dos metales. **Ahora, aparecen los siguientes nuevos casos: los compuestos de *refcode* FIQQAY, FIQQEC, FIQQIG y FIQQOM puente M-S-M y M-O-M, el compuesto KAZMEE**

punto M-N-M, los compuestos KUJFAX, MOQWIZ, NILKAV y RUQJUJ enlace S-M y el compuesto EMIZIK, puente de M-OH-M.

En dos de estos fragmentos hay también un enlace interno N-M, el cual no está presente en los NCS cabeza-cola.

En la Tabla 21 se recogen los *refcode* de los 7 compuestos, así como la configuración más probable y su deformación para 6 de ellos. Los nuevos compuestos se señalan en color rojo. No se han realizado medidas de la deformación de las estructuras mediante el programa del Área de Química explicado en este mismo capítulo.

Refcode	Metales	Distancias (Å)			Conformaciones		
		S-Me	N-Me	Me-S S-Me	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	Deformación
JONHUP	Pb Pb	---	---	---	---	---	---
KUNZIC	Na V	2.567 2.543			1.00 TC	1.00 TC	109 TC8
NOQYOH	Sn Eu	3.079 3.365			1.00 BC	0.80 BC 0.20 TBC	86 BC10
ZUDYIG	Gd Gd	3.056 2.941	2.505 2.491		1.00 BB	0.90 BB 0.10 S	79 BB3
ZUDYOM	Sm Sm	2.965 3.044	2.577 2.517		1.00 BB	0.90 BB 0.10 S	80 BB1
QISCOK	Ru Ru			2.299 2.320	0.81 TCC 0.19 BC	0.68 TCC 0.31 BC 0.07 CC	167 TCC4
NIRJED-1	Cu Cu			2.394 2.250	0.70 BB 0.30 S	0.66 BB 0.33 S 0.01 BC	126 BB2
NIRJED-2	Cu Cu			2.394 2.250	0.99 TBC 0.01 BC	0.75 TBC 0.24 BC 0.01 TC	78 TBC14
FIQQAY ⁽¹⁾	Re Re			2.367 2.371	1.00 TC		
FIQQEC ⁽¹⁾	Re Re			2.401 2.366	---		
FIQQIG ⁽¹⁾	Re Re			2.361 2.359	1.00 TC		
FIQQOM ⁽¹⁾	Re Re			2.363 2.352	1.00 CC		

Refcode	Metales	Distancias (Å)			Conformaciones		
		S-Me	N-Me	Me-S S-Me	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	Deformación
KAZMEE	Ti Ti		1.895 1.860 1.897 1.877		1.00 CC		
KUJFAX	Mn Mn	2.450			1.00 TBC		
MOQWIZ-1	Mn Mn	2.469			1.00 TBC		
MOQWIZ-2	Mn Mn	2.469			1.00 TBC		
NILKAV	Ag-Ni	2.523 2.580			1.00 S		
RUQJUJ	Re-Re	2.587			0.20 BC 0.80 TBC		
EMIZIK ⁽²⁾	Cd-Cd				1.00 S		

(1) Tiene puente de metal-oxígeno-metal siendo ambas distancias FIQQAY 1.977 Å y 1.869 Å, FIQQEC 1.968 Å y 1.872 Å, FIQQIG 1.936 Å y 1.912 Å y FIQQOM 1.933 Å y 1.929 Å

(2) Tiene puente de de metal-OH-metal ambas distancias 2.222 Å y 2.242 Å

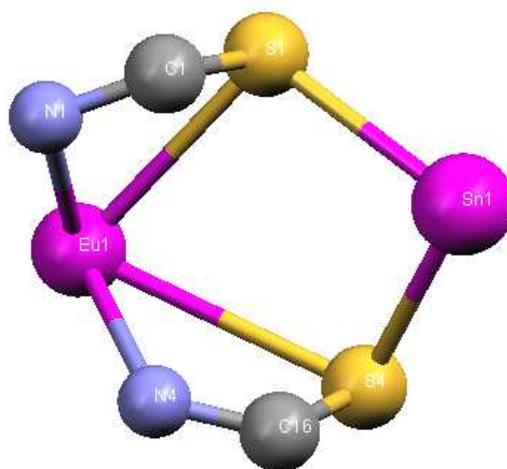
Tabla 21.- Fragmentos con enlace interno S-M, N-M y M-S-M.

Del análisis de los datos de estos compuestos que tienen enlaces internos se obtienen las siguientes conclusiones:

- En los compuestos con puente de S entre los dos (seis) metales, QISCOK posee una conformación *Twist chair chair*, FIQQAY Y FIQQIG son *Twist chair*, FIQQOM es *chair chair* y los dos fragmentos de NIRJED son *Boat boat* y *Twist boat chair*. Al compuesto de refcode FIQQEC no se le ha podido medir la probabilidad por no disponer de datos al respecto.

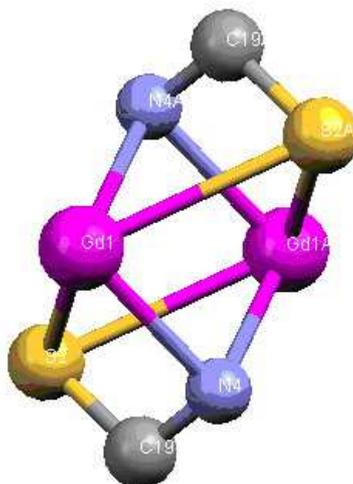
- De los cuatro (nueve) compuestos con enlace interno S-M, ZUDYIG y ZUDYOM tienen conformación *Boat boat*, KUNZIC *Twist chair* y NOQYOH *Boat chair*. KAZMEE es *Twist chair*, KUJFAX, MOQWIZ y RUQJUJ son *Twist boat chair* y NILKAV es *Sofa (Twist boat)*.

En las figuras 41 y 42 se recogen ejemplos gráficos de lo expuesto anteriormente.



NOQYOH

Figura 41



ZUDYIG

Figura 42

La presencia de enlaces metal-metal no es fácil de establecer. Hay 27 (52) compuestos donde la distancia entre los metales varía entre 2.083 y 2.754 Å. La aparición de 25 nuevos compuestos ha supuesto un aumento de 0.254 Å en la distancia máxima. Los que sobrepasan este valor máximo no presentan enlace interno metal-metal. En los fragmentos NCS cabeza-cola su máximo valor llegaba hasta los 3.011 Å. En la tabla 23 recogemos las distancias de los compuestos estudiados.

<i>Refcode</i>	DISTANCIA M-M (Å)	METAL	ENLACES AUTOR	<i>Refcode</i>	DISTANCIA M-M (Å)	METAL	ENLACES AUTOR
AFUROI	2.272	Re-Re	≡	IFAFOL	5.494	Cd-Cd	
AKANEF	5.434	Cd-Cd		IPAHEM	5,381	Cd-Cd	
ASIPAT	2.754	Pd-Pd	—	JADYOC	---	Pt-Pt	—
BAKHOL	5.385	Cd-Cd		JAMPAO	3,101	Pt-Pt	
BAKHUR	5.530	Cd-Cd		JAVPAX	5,671	Hg-Hg	
BAZCIO	---	Cd-Cd		JESKOH	---	Cu-Cu	
CATNIU	---	Pt-Pt		JIRQOR	2.756	Pd-Pd	—
CATNIU10	3.083	Pt-Pt		JONHUP	---	Pb-Pb	
CIPKAN	2.086	Mo-Mo	≡	KALPAP	3.176	Ag-Ag	
CUPGUQ	2.973	Pt-Pt	—	KAMROF	5,442	Cd-Cd	
CUPHIF	3.008	Pt-Pt	—	KAXZUE	4,17	Al-Al	
CUPHOL	3.003	Pt-Pt	—	KAZMEE	2.734	Ti-Ti	
CUPHUR	2.904	Pt-Pt	—	KUBMAW	5.405	Cd-Cd	
CUSHUT	---	Pt-Pt	—	KUBMEA	5.413	Cd-Cd	
DEBKIE	2,745	Pd-Pd		KUJFAX	4.175	Mn-Mn	
DEBQUX	2.729	Pd-Pd	—	LETLIF	5,508	Cd-Cd	
DEBTOU	2.802	Pd-Pd		MEKDUC	5.493	Cd-Cd	
DIFROA	2.890	Cu-Cu		MIKRAA	2.734	Pd-Pd	—
EHAPUY	2,924	Pt-Pt	—	MOQWIZ	4.212	Mn-Mn	
EJAKOP	2,532	Pt-Pt	—	NAXWOZ	2.698	Pd-Pd	—
EJAKUV	2,538	Pt-Pt	—	NAXWUF	2.538	Pt-Pt	—
FABVUB	2.629	Pt-Pt	—	NIRJED	2,745	Cu-Cu	
FANFUV	5,713	Cu-Cu		NOKPUY	2,556	Pt-Pt	—
FAWJIW	2,517	Pt-Pt	—	NOKQAF	2,553	Pt-Pt	—
FAWJOC	2,546	Pt-Pt	—	NUMRAO	5,411	Cd-Cd	
FAWJUI	2,554	Pt-Pt	—	NUVYEJ	2.481	Cu-Cu	
FEGFEC	5,373	Cd-Cd		PAKLIW	2,603	Rh-Rh	—
FELBON	---	Pd-Pd	—	PEMPED	5.534	Cd-Cd	
FELBON10	2,677	Pd-Pd	—	PESTOW	3,643	Co-Co	
FETCAI	2,497	Rh-Rh	≡	PIBFIQ	5.204	Cd-Cd	
FETCEM	2,490	Rh-Rh	≡	PILZOA	2.730	Pd-Pd	—
FIQQAY	2.533	Re-Re	≡	PONLEK	2.748	Pd-Pd	
FIQQEC	2.542	Re-Re	≡	PONLIO	2.760	Pd-Pd	
FIQQIG	2.549	Re-Re	≡	PYMTMO	2,083	Mo-Mo	≡
FIQQOM	2.537	Re-Re	≡	QEKFES	2.948	Ag-Ag	—
FISHIZ	3.373	Ag-Ag		QEKGOC	4,383	Fe-Fe	
FOPJAV	2,679	Pt-Pt	—	QISCOK	2,693	Ru-Ru	—
FOPJEZ	2,532	Pt-Pt	—	QIXBOP	2.616	Ni-Ni	
FOWDIE	2,754	Pt-Pt	—	QIXBUV	2.622	Ni-Ni	
GALXAS	2,731	Ir-Ir	—	RAPVAF	5,393	Cd-Cd	
GOBFEI	5,572	Cd-Cd		RAPVAF01	---	Cd-Cd	
GOBFEI01	5,518	Cd-Cd		RAPVEJ	5,506	Cd-Cd	
GODLOB	2.968	Ag-Ag	—	RUQUJ	4.420	Re-Re	
SANMOK	2.739	Pd-Pd	—	TUHMAL	2.734	Pd-Pd	—

Refcode	DISTANCIA M-M (Å)	METAL	ENLACES AUTOR	Refcode	DISTANCIA M-M (Å)	METAL	ENLACES AUTOR
SESBAT	5,374	Ag-Ag		TUIZOD	2.941	Ag-Ag	
SEZKEN	2,089	Mo-Mo	==	UNAVAH	2.552	Cu-Cu	
SIWZIH	5,390	Cd-Cd		VEKFEW	2,649	Ni-Ni	—
SUJMUG	5.448	Cd-Cd		VOMBIJ	5.452	Cd-Cd	
SUJNAN	5.510	Cd-Cd		WALHUL	5.586	Cd-Cd	
SUJNER	5.447	Cd-Cd		WEXVIE	2,130	Mo-Mo	≡
SUJNIV	5.440	Cd-Cd		XUDKOX	2.747	Cu-Cu	—
TEFJUK	2.927	Cu-Cu		YERZEA	2,915	Pd-Pd	
TIMXOD	5.619	Pb-Pb		YERZOK	2,97	Pd-Pd	
TUHLAK	2.563	Ni-Ni	—	YOFYIB	2,245	Re-Re	≡
TUKVAW	5,361	Cd-Cd		YUMCIS	6,091	Hg-Hg	
TUHLEO	2.225	Ni-Ni	—	ZUDYIG	3,017	Gd-Gd	
TUHLOY	2.574	Ni-Ni	—	ZUDYOM	3,62	Sm-Sm	
TUHLUE	2.727	Pd-Pd	—				

Tabla 22.- Compuestos que presentan enlace metal-metal

De los 27 (52) compuestos con enlace metal-metal el más abundante es el platino (el 75% (83%) de sus estructuras presentan este enlace). Casi la mitad (38%) de los compuestos son de este metal (12 de 27) (19 de 52). El siguiente es el molibdeno con 4 (ahora es el paladio con 12), presentando todos sus compuestos este enlace interno. No hay un solo compuesto de cobre, metal más abundante (27 de 83) en los fragmentos cabeza-cola. En la Tabla 23 se recogen los datos de este tipo de enlace para las dos búsquedas en la disposición cabeza-cabeza.

NCS CABEZA-CABEZA 2006				NCS CABEZA-CABEZA 2012			
Metal	número	total	%	Metal	número	total	%
Platino	12	16	75	Platino	19	22	83.36
Molibdeno	4	4	100	Molibdeno	4	4	100
Paladio	3	6	50	Paladio	11	18	61.11
Rodio	3	3	100	Rodio	3	3	100
Renio	2	2	100	Renio	6	7	85.7
Níquel	1	1	100	Níquel	4	6	66.7
Rutenio	1	1	100	Rutenio	1	1	100
Iridio	1	1	100	Iridio	1	1	100
TOTAL	27	34		Plata	2	6	33.3
				Cobre	1	7	14.28
				TOTAL	52	75	

Tabla 23

La plata es el único nuevo metal que presenta enlace metal-metal en los fragmentos NCS cabeza-cabeza. En 2006 sólo había un caso y no presentaba este enlace.

Los fragmentos NCS cabeza-cola (cuyos datos se han obviado ahora) presentan (en 2006) enlace metal-metal en el cobre, oro, osmio y plata para los que no hay enlace en los cabeza-cabeza (en 2012 sí hay plata).

En la Tabla 24 se muestra la media de las distancias de enlace metal-metal para las dos búsquedas, así como el rango de distancias encontradas para cada metal. Fijándonos en el valor medio, la mayor distancia la presenta el iridio con 2.731 Å (valor límite según el criterio establecido), seguida del paladio y el rutenio. Estos valores, que no han variado sustancialmente a excepción de níquel y renio, son menores que los que presentan los mismos metales en disposición cabeza-cola, cuyos datos se han eliminado de la tabla para facilitar la nueva comparación.

	2006	2012	Diferencia (Å)
Metal	Cabeza-cabeza (Å)	Cabeza-cabeza (Å)	
Iridio	2.731	2.731	0.000
Paladio	2.715	2.727	-0.013
Rutenio	2.693	2.693	0.000
Níquel	2.649	2.502	0.146
Platino	2.643	2.690	-0.048
Rodio	2.546	2.530	0.016
Renio	2.258	2.486	-0.229
Molibdeno	2.106	2.097	0.009
Plata	---	2.958	---
Cobre	---	2.747	---

Tabla 24: distancias de enlace metal-metal

En los metales paladio, rodio, renio y molibdeno la diferencia de distancia media supera los 0.2 Å respecto a los de disposición cabeza-cola.

En la Tabla 25 se recogen las distancias de enlace para los distintos metales:

METAL	Distancia menor (Å)	Distancia mayor (Å)	Media (Å)
Rodio	2.490	2.603	2.546
Paladio	2.677	2.754 (2.756)	2.715 (2.716)
Iridio	2.731	2.731	2.731
Rutenio	2.693	2.693	2.693
Platino	2.532 (2.530)	2.754 (3.008)	2.643 (2.769)
Renio	2.245	2.272 (2.549)	2.258 (2.397)
Molibdeno	2.083	2.130	2.106
Níquel	2.649	2.649	2.649
Plata	2.968	2.968	2.968
Cobre	2.849	2.849	2.849

Tabla 25.- Distancias de enlace para distintos metales

Los mayores aumentos en los valores medios se dan en los metales platino y renio. Los metales restantes apenas sufren variación en ambas distancias.

Hay 64 (99) fragmentos que contienen enlace metal-metal pero de dos (seis) de ellos no tenemos información de su conformación:

- | | |
|----------------|---------------|
| • CR 0 (0) | • CR 0 (0) |
| • BB 11 (34) | • BB 20 (61) |
| • S 28 (64) | • S 37 (102) |
| • B 1 (13) | • B 3 (21) |
| • C 0 (0) | • C 0 (1) |
| • TC 2 (13) | • TC 4 (25) |
| • TCC 8 (18) | • TCC 8 (22) |
| • CC 5 (15) | • CC 9(27) |
| • BC 7 (21) | • BC 18 (54) |
| • TBC 0 (6) | • TBC 0 (15) |
| Total 64 (193) | Total 99(328) |

El porcentaje de cada configuración respecto de los 180 (328) fragmentos de los que disponemos datos es el siguiente:

• S	43.75%	(31.10%)
• BB	17.20%	(18.60%)
• TCC	12.50%	(6.71%)
• BC	10.94%	(16.46%)
• CC	7.81%	(8.23%)
• TC	3.13%	(7.62%)
• B	1.56%	(6.40%)
• CR	0%	(0%)
• TBC	0%	(4.57%)
• C	0%	(0.30%)

Dentro de los compuestos que tiene enlace metal-metal, las configuraciones de mayor abundancia (ver Tabla 26) son las siguientes:

- Platino (24), 75% *sofa* y 16.67% *twist chair chair* y 8.33% no hay información.
- Molibdeno (8), 37.5% *boat boat*, 37.5% *chair chair* y 25% *twist boat chair*.
- Rodio (16), 43.75% *sofa*, 25% *boat chair*, 12.5% *twist chair chair* y *boat boat* y 6.25% *twist chair*.
- Renio (5), 20% *sofa*, *twist chair* y *twist chair chair* y 40% *chair chair*.
- Paladio (3) 66.67% *boat boat* y 33.33% *sofa*.
- Niquel (4) 50% *boat boat*, 25% *sofa* y *boat chair*.
- Rutenio y iridio (1), 100% *twist chair chair* y *boat*, respectivamente.
- Ninguno compuesto presenta la conformación *chair* ni *twist boat chair*

Metal (compuestos)	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total Frag.
Platino (12)			18 75%				4 16.7%				24
Molibdeno (4)		3 37.5%						3 37.5%	2 25%		8
Paladio (3)		2 66.67%	1 33.33%								3
Rodio (3)		2 12.5%	7 43.75%			1 6.25%	2 12.55		4 25%		16
Renio (2)			1 20%			1 20%	1 20%	2 40%			5
Níquel (1)		2 50%	1 25%						1 25%		4
Rutenio (1)							1 100%				1
Iridio (1)				1 100%							1

Tabla 26.- Distribución de configuraciones para los compuestos con enlaces metal-metal

Con los nuevos datos la Tabla 26 queda así:

Metal (compuestos)	C R	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total Frag.
Platino (17)		2 6.25%	25 78.13%				4 12.5%	1 3.13%			32
Molibdeno (4)		3 37.5%						3 37.50%	2 25.00%		8
Paladio (9)		6 35.29%	2 11.76%	1 5.88%				2 11.76%	6 35.29%		18
Rodio (3)		2 12.5%	7 43.75%			1 6.25%	2 12.5%		4 25.00%		16
Renio (5)			1 12.5%			3 37.5%	1 12.5%	3 37.50%			8
Níquel (4)		6 42.86%	1 7.14%	1 7.14%					6 42.86%		14
Rutenio (1)							1 100%				1
Iridio (1)				1 100%							1
Plata (1)		1 100%									1
Cobre (1)			1 100%								1

Las configuraciones de mayor abundancia son ahora:

- Platino (32), 78% *Sofa*, 13% *Twist chair chair* y 9% no hay información.
- Molibdeno (8), 37.5% *Boat boat*, 37.5% *Chair chair* y 25% *Twist boat chair*.
- Rodio (16), 43.75% *Sofa*, 25% *Boat chair*, 12.5% *Twist chair chair* y *Boat boat* y 6.25% *Twist chair*.
- Renio (5), 12.50% *Sofa*, y *Twist chair chair* y 37.50% *Chair chair* y *Twist chair*.
- Paladio (9), 35.3% *Boat boat* y *Boat chair*, 11.8% *Sofa* y *Chair chair*, y 5.9% *Boat*.
- Niquel (4) 42.9% *Boat boat* y *Boat chair*, 7.1 % *Sofa* y *Boat*.
- Rutenio y iridio (1), 100% *Twist chair chair* y *Boat*, respectivamente.
- Cobre (1), 100% *Sofa*.
- Ningún compuesto presenta la conformación *Chair* ni *Twist boat chair*.

Finalmente, vamos a realizar un resumen acerca de la distribución de las configuraciones para la totalidad de fragmentos con la función NCS cabeza-cabeza con enlace metal-metal y para los que no lo presentan. Además haremos una comparación con los datos de NCS cabeza-cola. En la Tabla 27 se reflejan los datos de los dos fragmentos **para las dos búsquedas cabeza-cabeza (se ha eliminado de la tabla de 2006 la disposición cabeza-cola:**

2006	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
NCS (total)	0 0%	34 18.5%	64 34.8%	13 7.15%	0 0%	13 7.1%	18 9.8%	15 8.2%	21 11.4%	6 3.2%	184
NCS (sin enlace)	0 0%	23 18.9%	36 29.5%	12 9.8%	0 0%	11 9.0%	10 8.2%	10 8.2%	14 11.5%	6 4.2%	122
NCS (con enlace)	0 0%	11 17.2%	28 43.8%	1 1.7%	0 0%	2 3.1%	8 12.5%	5 7.8%	7 10.9%	0 0%	62
2012	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
NCS (total)	0 0%	61 18.60%	102 31.10%	21 6.40%	1 0.30%	25 7.62%	22 6.71%	27 8.23%	54 16.46%	15 4.57%	328
NCS (sin enlace)	0 0%	17 19.32%	12 13.64%	13 14.77%	0 0.00%	9 10.23%	1 1.14%	11 12.50%	16 18.18%	9 10.23%	88
NCS (con enlace)	0 0%	21 21.00%	37 37.00%	3 3.00%	0 0.00%	4 4.00%	8 8.00%	9 9.00%	18 18.00%	0 0%	100

Tabla 27

De la observación de la misma se extraen los siguientes datos:

1.- Comparando las configuraciones que presentan enlace metal-metal con las que no lo presentan para los fragmentos NCS:

- La configuración más abundante en ambos casos es la *Sofa* con 43.8% y 29.5%, respectivamente.
- No hay configuraciones *Crown*, *Twist boat chair* ni *Chair*.

2.- Comparando las configuraciones que presentan enlace metal-metal para fragmentos NCS cabeza-cabeza y fragmentos NCS cabeza-cola:

- La configuración más abundante es la *Sofa* con 43.8% y *Boat* con 49.4%, respectivamente.
- No existen configuraciones *Crown* para ambas, pero sí hay *Chair* y *Twist boat chair* para los fragmentos cabeza-cola.
- Para las configuraciones *Twist chair chair* y *Chair chair* la distribución porcentual es similar en ambas disposiciones.
- Para las restantes configuraciones la distribución porcentual es diferente.

Podemos afirmar, como conclusión, que ambas disposiciones de fragmentos de NCS tienen porcentajes muy diferentes en sus estructuras más abundantes mientras que en las restantes muestran menos diferencias porcentuales.

De la comparación de los resultados de la disposición cabeza-cabeza para ambas búsquedas se extraen los siguientes datos:

1.- Comparando las configuraciones que presentan enlace metal-metal con las que no lo presentan para los fragmentos NCS:

- La configuración más abundante sin enlace es *Boat boat* con 19.3% y con enlace es la *Sofa* con 37.5%.
- No hay configuraciones *Crown* ni *Chair*. Hay configuración *Twist boat chair* en los fragmentos sin enlace y no la hay en los que sí tienen enlace.

2.- Comparando las configuraciones que presentan enlace metal-metal para fragmentos NCS cabeza-cabeza en 2006 y 2012:

- La configuración más abundante en ambos casos es la *Sofa* con 43.8% y 37.0%, respectivamente.
- No existen configuraciones *Crown* para ambas, pero sí hay *Chair* y *Twist boat chair* para los fragmentos cabeza-cabeza de 2012.
- Para las configuraciones *Twist chair chair* y *Chair chair* la distribución porcentual es similar en ambas búsquedas.
- Para las restantes configuraciones la distribución porcentual es similar.

Como conclusión, podemos afirmar que las variaciones producidas al duplicarse el número de datos entre ambas búsquedas son mínimas.

II.3.4.- Conformación

Algunos compuestos presentan un tipo de estructura de entre los cinco casos siguientes:

- **Caso 1.-** Dos fragmentos con los dos átomos metálicos en común, formando cada uno un plano.

Fragmento M1–S2–C15–N4–M2–N3–C1–S2 (Plano horizontal)

Fragmento M1–N2–C43–S4–M2–N3–C29–N1 (Plano vertical)

Como ejemplo podemos citar el compuesto de *refcode* CIPKAN (Figura 43).

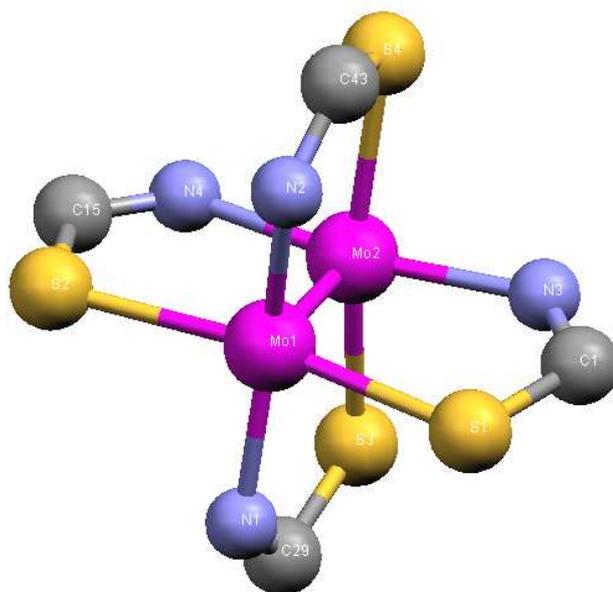


Figura 43.- Fragmento de CIPKAN

- **Caso 2.-** Dos fragmentos con los átomos metálicos en común y formando un ángulo de 90°:

Fragmento M1–N1–C1A–S1A–M1A–S3A–C8A–N3 (1^{er} cuadrante)

Fragmento M1–S3–C8–N3A–M1A–N1A–C1–S1 (3^{er} cuadrante)

Ejemplo: ASIPAT (Figura 44)

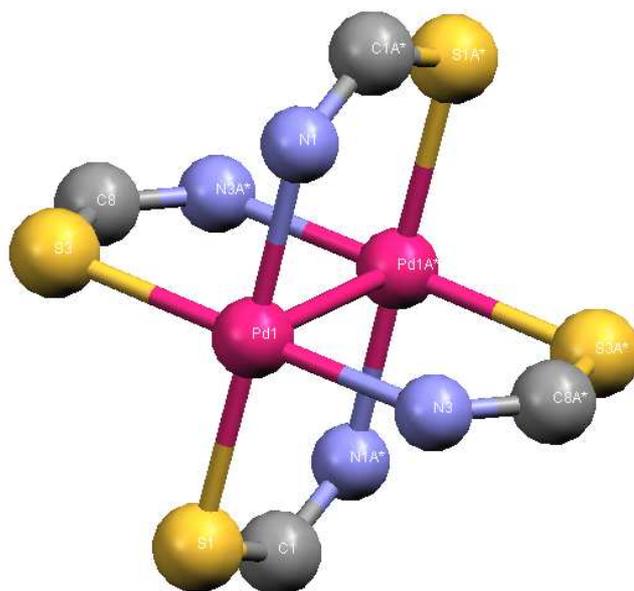


Figura 44.- Fragmento de ASIPAT

- **Caso 3.-** Tres fragmentos con los átomos metálicos en común, uno de ellos formando un plano y los otros dos un ángulo de 90°:

Fragmento M1–S2–C5–N3–M2–N7–C13–S4 (plano horizontal)

Fragmento M1–S3–C9–N5–M2–S3–C5–S2 (2º cuadrante)

Fragmento M1– S3–C9–N5–M2–N7–C13–S4 (3^{er} cuadrante)

Ejemplo: FAWJIW (Figura 45)

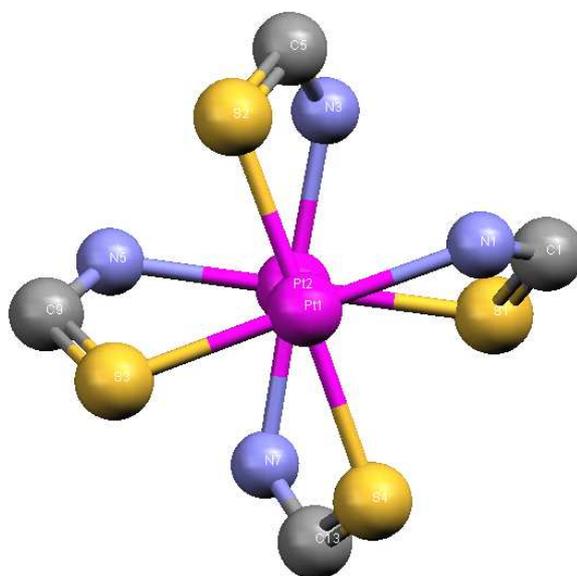


Figura 45.- Fragmento de FAWJIW

- **Caso 4.-** Un fragmento plano (180°):

Ejemplo: OJOVAK (Figura 46).

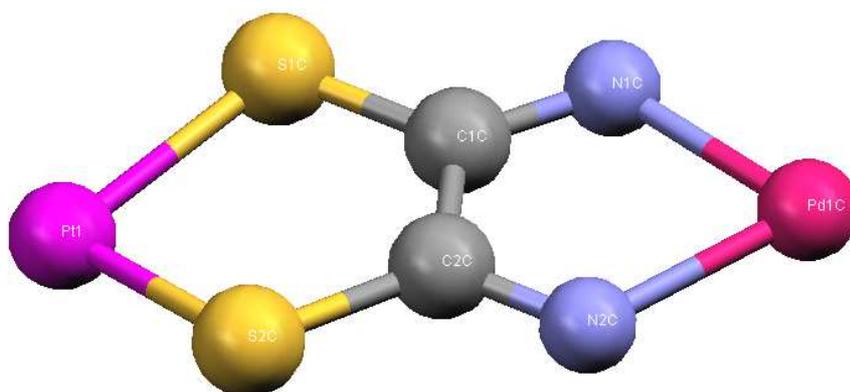


Figura 46.- Fragmento de OJOVAK

- **Caso 5** : Cuatro fragmentos con los dos átomos metálicos comunes y dispuestos en ángulo de 90°:

Fragmento M1A–N2A–C8–S3–M1–S1–C1–N1A (1^{er} cuadrante)

Fragmento M1–S1A–C1A–N1–M1–S3–C8–N2A (2^o cuadrante)

Fragmento M1–S1A–C1A–N1–M1–N2–C8A–S3A (3^{er} cuadrante)

Fragmento M1A–N1A–C1–S1–M1–N2–C8A–S3A (4^o cuadrante)

Ejemplo: DEBKIE (Figura 47).

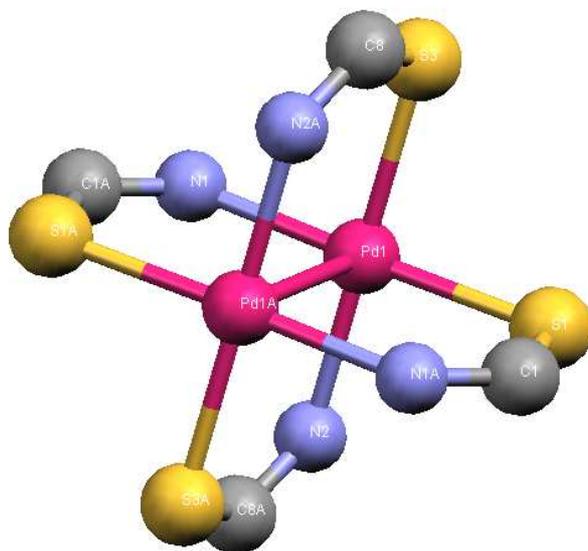


Figura 47.- Fragmento de DEBKIE

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

III.1.- Estudio detallado de la conformación de los anillos de 8 miembros con el fragmento N-C-S en disposición Cabeza-Cabeza.

Tras la clasificación en el capítulo anterior de los 93 (172) compuestos encontrados y un estudio general de los mismos, se pretende en este apartado profundizar para un grupo más reducido. Para seleccionar dicho grupo nos basamos en los aspectos abordados en apartados anteriores con el fin de no ser reincidentes.

El grupo seleccionado será el de la función tiocianato como en 2006, con 25 (44) compuestos y 29 (63) fragmentos (no se dispone de datos de 3 (4) compuestos) y la función isotiocianato, con 6 (11) compuestos y 7 (21) fragmentos (sin datos de un compuesto), lo que hace un total de 31 (55) compuestos y 36 (84) fragmentos. Para ello nos basamos en los siguientes aspectos:

1. Se conoce la estructura plana de los tres compuestos encontrados con enlace carbono-carbono, no perteneciendo ninguno de ellos a las citadas funciones.
2. No tenemos ningún compuesto con enlace interno S–Metal, al contrario que ocurría en compuestos cabeza-cola que de sus 42 compuestos (56 fragmentos) presentan enlace S–Metal grupo de desecharíamos si lo hubiéramos tenido.
3. Ningún tiocianato o isotiocianato presenta enlace metal-metal, ya se han estudiado algunos aspectos de los compuestos con este enlace.

Con los nuevos datos, estos aspectos no han variado.

III.2.- Criterios utilizados

Una vez realizado el estudio estructural de los compuestos seleccionados vamos a revisar los diversos criterios y a establecer posibles relaciones entre ellos: metales, funciones químicas y configuraciones (estructura), añadiendo, además, el grado de deformación de estas últimas (este criterio no se estudia en este TFG de 2012).

III.2.1.- Metales

De los 31 (55) compuestos, 21 (28) son homodinucleares (68%) (51%) y 10 (27) son heterodinucleares (32%) (49%). La mayoría de los metales no aparecen en el grupo de compuestos a los que ha quedado reducida la muestra: platino, paladio, molibdeno, rodio, cobre, renio, rutenio, aluminio, iridio, níquel, samario, gadolinio, plomo, **titanio, manganeso, calcio, litio, indio, praseodimio y wolframio**. Sólo permanecen hierro, cobalto, plata, cadmio, mercurio, bismuto, potasio, cesio, bario, **praseodimio, wolframio e indio**.

En la primera Tabla Periódica que se expone a continuación, se marcan en color verde los metales que aparecen en ambas búsquedas y en color rojo los nuevos metales aparecidos en la última búsqueda. En la segunda Tabla Periódica, se resaltan sobre fondo amarillo los elementos metálicos que ya no aparecen en los compuestos seleccionados para el nuevo estudio.

1																	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq				
		* Lantánidos															
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
		# Actínidos															
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

1																	18
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq				
		* Lantánidos															
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
		# Actínidos															
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

En las Tablas 28 y 29 se especifican los metales de los 21 (28) compuestos homodinucleares y 10 (26) heterodinucleares seleccionados. Para cada metal nos dan información sobre la cantidad de compuestos y fragmentos y las configuraciones que presentan.

METALES	COMPUESTOS	FRAGMENTOS	CONFIGURACIONES
Cd	*16 (24)	14 (28)	BC,B,TC,CC,TBC
Hg	2	2	BC,BB
Fe	2	3	TCC,BB,S
Ag	1	1	BB
Pb	1	1	BC,CC

* Faltan datos en dos compuestos

Tabla 28

El cadmio es el metal más abundante con 16 (24) de 21 (30) compuestos (76.2%) (80.0%), seguido de hierro y mercurio con 2 compuestos cada uno (9.5%) (6,7%) y la plata con un compuesto (4.8%) (3.3%). Aparece el plomo con un compuesto (3.3%). Destacamos la ausencia de platino, el metal más abundante en la búsqueda inicial.

METALES	COMPUESTOS	FRAGMENTOS	CONFIGURACIONES
Cd-Ag	2 3	6 7	TC,BB,BC,CC,S,TBC
K-Hg	2 3	2 5	CC, BC
K-Bi	2	4 5	BC,TC,BB, S
Cd-Cs	2	2	TC
Ag-Co	1	1	TBC
Ba-Cu	1	1	BC
Cu-W	1	1	BC
In-K	1	4	S,BB,BC,BB
Ag-Fe	6	13	S,C,TC,CC,BC,TCC
Cu-Hg	2	2	TCC, B
Hg-Na	1	3	S,TBC,BC
Cd-Hg	1	1	S
Ag-Pr	2	5	S,BB,BC,CC
K-Cd	1	2	BC

Tabla 29

En los 10 (27) compuestos heterodinucleares los metales más abundantes son el cadmio y el potasio, presentes en 4, seguidos de la plata con 3, mercurio, cesio y bismuto con 2 y cobalto, bario y cobre con uno. Ahora, el primer lugar lo ocupa la plata con 12 compuestos, seguido del mercurio con 8. El cadmio y potasio ocupan,

igualados, el tercer lugar con 7 cada uno. Aparece en quinto lugar el hierro con 6 compuestos.

En los casos que ya existían un determinado enlace metal-metal, el número de compuestos, fragmentos y configuraciones apenas ha aumentado.

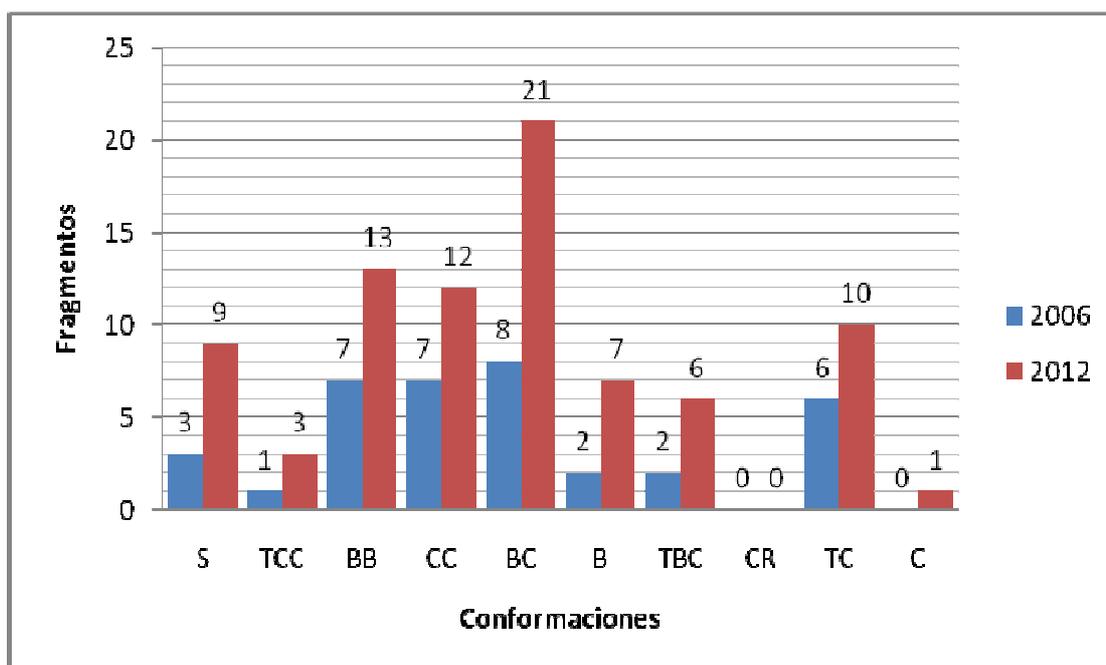
Es llamativo el dato de que para los nuevos enlaces:

- In-K: hay 4 fragmentos y cada uno es de una configuración diferente.
- Cu-Hg: hay 2 fragmentos y cada uno es de una configuración diferente.
- Hg-Na: hay 3 fragmentos y cada uno es de una configuración diferente.
- Ag-Pr: hay 5 fragmentos y 4 configuraciones diferentes.

III.2.2.- Conformaciones.

En el gráfico adjunto se recogen las conformaciones que presentan los 36 (82) fragmentos de los 31 (55) compuestos de tiocianatos e isotiocianatos (recordemos que no hay datos de 4 compuestos).

La tabla adjunta presenta, en color rojo, los datos correspondientes a la nueva búsqueda:



De las 10 configuraciones posibles ningún fragmento adopta la *Crown* ni la *Chair* (ahora hay una *Chair*). La más abundante es la *Boat chair* con 8 (21) fragmentos, 22.22% (27%) del total, seguida por la *Chair chair* (12 fragmentos, 15%) y *Boat boat* (13 fragmentos, 16%) con 7 cada uno, (19.44%), *Twist chair* con 6 (10) (16.67%, 11%), *Sofa* con 3 (9) (8.33%, 11%), *Boat* (7, 9%) y *Twist boat chair* con 2 (6, 8%) (5.56%) y finalmente, la *Twist chair chair* con 1 (3) (2.78%, 3%). Aparece la conformación *Chair* con 1 fragmento (1%).

Seguidamente vamos a comparar estos resultados con los obtenidos para los 93 compuestos iniciales, cuyos datos se recogen en la Tabla 30, incorporando, en color rojo, los datos de la nueva búsqueda.

CONFIGURACIÓN	FRAGMENTOS SOBRE EL TOTAL DE LA SELECCIÓN	% SOBRE EL TOTAL DE LA SELECCIÓN	FRAGMENTOS SOBRE EL TOTAL DE COMPUESTOS	% SOBRE EL TOTAL DE COMPUESTOS
CR	0	0%	0	0%
BB	7 (13)	19.44% (15.85%)	34 (61)	18.48% (18.60%)
S	3 (9)	8.33% (10.98%)	64 (102)	34.78% (31.20%)
B	2 (7)	5.56% (8.54%)	13 (21)	7.06% (6.40%)
C	0 (1)	0% (1.22%)	0 (1)	0% (0.30%)
TC	6 (10)	16.67% (12.20%)	13 (25)	7.06% (7.62%)
TCC	1 (3)	2.78% (3.66%)	18 (22)	9.78% (6.71%)
CC	7 (12)	19.44% (14.63%)	15 (27)	8.15% (8.23%)
BC	8 (21)	22.22% (25.61%)	21 (54)	11.41% (16.46%)
TBC	2 (6)	5.56% (7.32%)	6 (15)	3.26% (4.57%)
Total	36 (82)	100%	184 (328)	100%

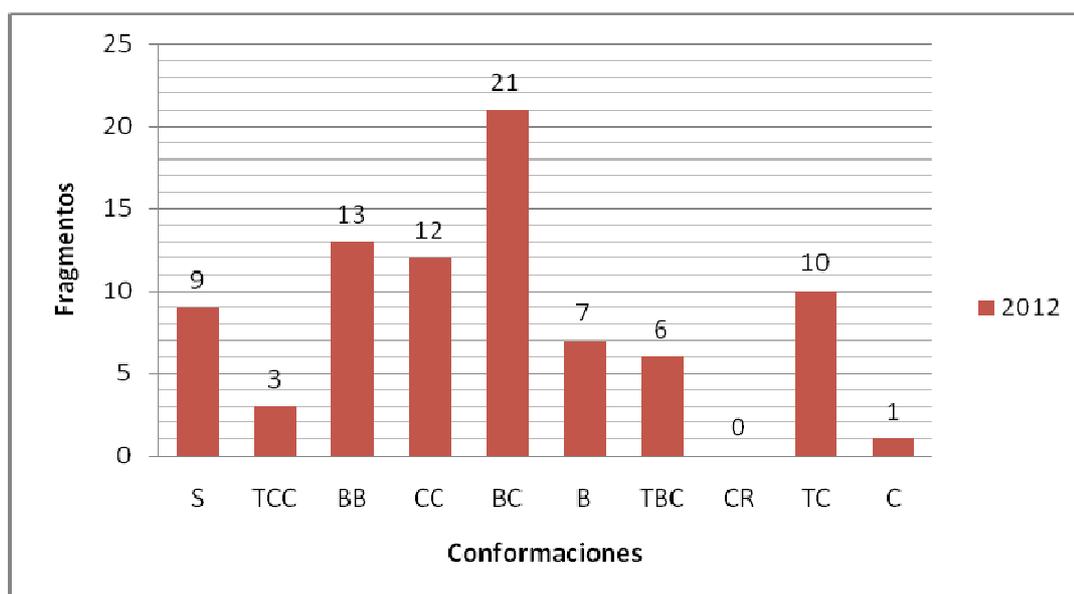
Tabla 30

Los resultados de la comparación son:

- Hay similitud en los datos de la conformación *Boat boat* (19.44% frente a 18.48%) y la ausencia de *Crown* y *Chair*. Ahora hay una cierta discrepancia, 15.85% frente a 18.60%. Aparece una conformación *Chair*.
- Hay gran diferencia en la configuración *Sofa* (8.33% (10.98%)) frente a 34.78% (31.20%).
- En las configuraciones restantes persiste la diferencia pero de forma menos acusada.

Como conclusión, la configuración *Boat chair* pasa a ser la más abundante en detrimento de la *Sofa* y se observan apreciables diferencias en los porcentajes de las restantes, excepto en la configuración *Boat boat*, que se mantienen.

Seguidamente se comparan los resultados obtenidos para NCS cabeza-cabeza de 2006 y 2012 como refleja la Tabla 31 y el gráfico que le sigue. Para ello, previamente, en el gráfico adjunto se recogen los resultados obtenidos para los nuevos 82 fragmentos.



De los datos recogidos en la Tabla 31, se observa una diferencia clara entre las dos disposiciones. Sólo hay similitud en la configuración *Twist boat chair*. Las demás parejas de configuraciones son muy distintas, siendo la *Boat chair* la más abundante en la disposición cabeza-cabeza y la *Twist boat* en la cabeza-cola.

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	FRAGMENTOS
Cabeza-cabeza	0	7	3	2	0	6	1	7	8	2	36
%	0	19.44	8.33	5.56	0	16.67	2.78	19.44	22.22	5.56	100
Cabeza-cola	0	12	2	26	40	51	1	8	20	11	171
%	0	7.02	1.17	15.20	23.39	29.82	0.58	4.68	11.69	6.43	100

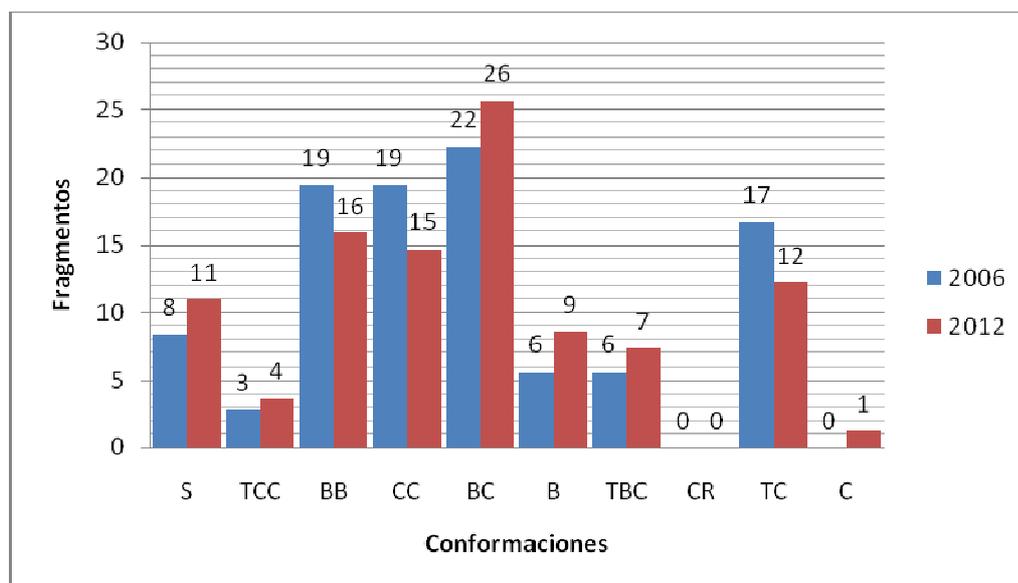
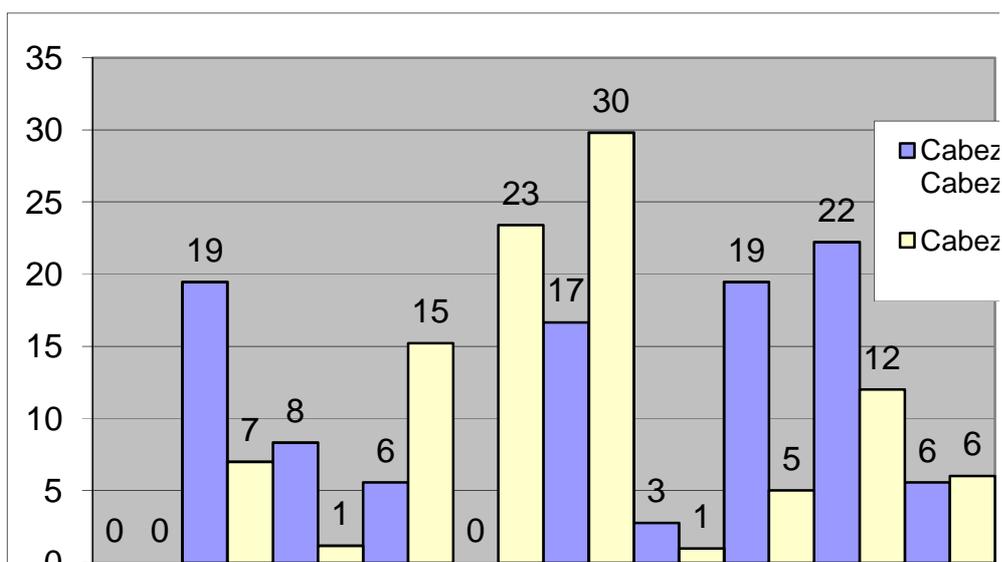
Tabla 31.- Porcentajes de conformaciones cabeza-cabeza y cabeza-cola

Ahora, en este TFG, se modifica la tabla para efectuar la comparación entre las dos búsquedas de la disposición cabeza-cabeza, apareciendo en color rojo los datos de la última de ellas.

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	FRAGMENTOS
Cabeza-cabeza	0	7	3	2	0	6	1	7	8	2	36
%	0.00	19.44	8.33	5.56	0.00	16.67	2.78	19.44	22.22	5.56	100
Cabeza-cabeza	0	13	9	7	1	10	3	12	21	6	82
%	0.00%	15.85	10.98	8.54	1.22	12.20	3.66	14.63	25.61	7.32	100

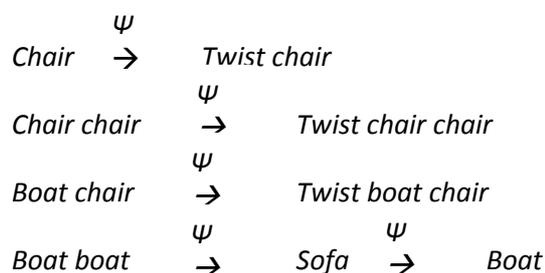
Tabla 31.- Porcentajes de conformaciones cabeza-cabeza (2006) y cabeza-cabeza (2012)

Las variaciones en los resultados son poco significativas.



En el gráfico de comparación de porcentajes se observa que las variaciones son mínimas entre ambas búsquedas.

Las diez conformaciones teóricas del ciclooctano se relacionan entre sí por diferentes rutas o vías. Una de ellas es la pseudorotación, que consiste en la variación de todos los ángulos de torsión del anillo para pasar de una configuración a otra. Hay cuatro de éstas vías:



Si se estudian los datos anteriores desde este nuevo punto de vista se observan los resultados recogidos en la siguiente tabla:

CONFORMACIONES	CABEZA-CABEZA (%)	CABEZA-COLA (%)
C→TC	17	53
CC→TCC	22	6
BC→TBC	28	18
BB→S→B	33	33

Tabla 32

Se observa una semejanza de porcentajes en la pseudorotación BB→S→B. En las restantes pseudorotaciones, la C→TC disminuye de forma significativa en cabeza-cabeza respecto a cabeza-cola, la CC→TCC se cuadruplica y la BC→TBC se duplica.

La nueva tabla con los porcentajes de las conformaciones cabeza-cabeza de los años 2006 y 2012 queda así:

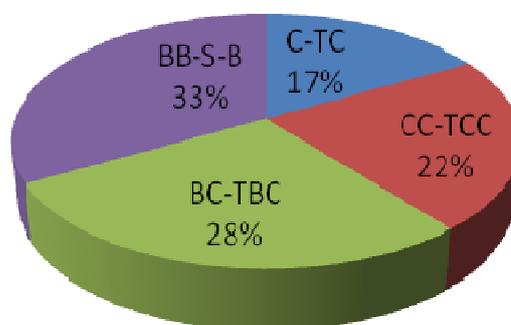
CONFORMACIONES	2006	2012
	CABEZA-CABEZA (%)	CABEZA-CABEZA (%)
C→TC	17	13
CC→TCC	22	19
BC→TBC	28	33
BB→S→B	33	36

Tabla 33

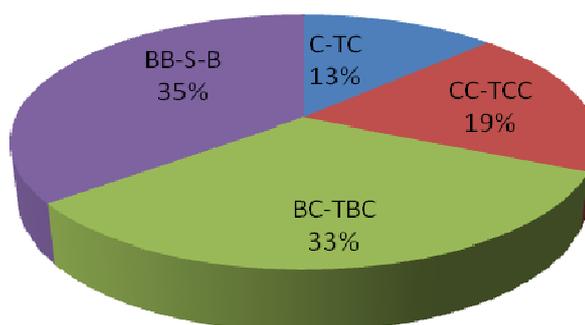
Las variaciones producidas son mínimas.

En los gráficos siguientes se observa la variación de las pseudorotaciones en la disposición cabeza-cabeza para ambas búsquedas:

Conformaciones Cabeza-Cabeza 2006



Conformaciones cabeza-cabeza 2012



Se observa una semejanza de porcentajes en todas las pseudorotación.

III.2.2.1.- Deformación de las estructuras

Este apartado no se ha estudiado en el presente TFG. En la Tabla 34 se observan las deformaciones medias de las configuraciones en disposición cabeza-cabeza y cabeza-cola. En la disposición cabeza-cabeza la configuración menos deformada es *Twist boat chair* (42°), seguida de *Sofa*, *Boat* y *Boat chair* con deformación >60°. Por el contrario, en la disposición cabeza-cola la menos deformada es *Twist chair* (44°) y la más abundante es la *Sofa*.

En ambos casos los resultados son similares en cuanto a su deformación media, teniendo la disposición cabeza-cola un intervalo de deformación mucho más amplio.

CONFIGURACIÓN	DEFORMACIÓN MEDIA (°)		INTERVALO DE LA DEFORMACIÓN	
	Cabeza-cabeza	Cabeza-cola	Cabeza-cabeza	Cabeza-cola
BB	214 (>60°)	209.2 (>60°)	163 - 276	88 – 347
S	192 (>60°)	256.5 (>60°)	152 - 260	255 – 258
B	262 (>60°)	195.8 (>60°)	261 - 263	62 – 354
C	----	126.8 (45°)	----	43 – 340
TC	139 (50°)	123.1 (44°)	89 - 164	36 – 163
TCC	121 (44°)	130.0 (46°)	121	130
CC	127.6 (45°)	140.5 (50°)	91 – 197	98 – 185
BC	222 (>60°)	239.1 (>60°)	120 - 264	145 – 307
TBC	117 (42)	185.2 (>60°)	99 - 128	92 – 356
CR	----	----	----	----

Tabla 34.- Deformaciones medias de las configuraciones encontradas.

En la Tabla 35 se recogen las deformaciones medias de los compuestos con metales homodinucleares de cada configuración según el metal así como el número de fragmentos según intervalos de deformación de 15°. Para los metales más abundantes observamos que el cadmio y el hierro son los que tienen las estructuras menos deformadas, mientras que el mercurio y la plata se encuentran en el caso opuesto.

De forma general observamos que los intervalos con mayor número de fragmentos son los de >60°, por lo que podemos decir que las deformaciones son altas o muy altas. Esta conclusión es muy similar para la disposición cabeza-cola en la que las deformaciones también son muy altas.

METAL	Nº FRAGMENTOS	DEFORMACIÓN MEDIA	DISTRIBUCIÓN	
			DEFORMACIÓN	Nº FRAGMENTOS
Cd	14	57	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	6
			45º-60º	3
			>60º	5
Fe	3	55	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	1
			45º-60º	2
			>60º	-
Hg	2	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	-
			45º-60º	-
			>60º	2
Ag	1	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	-
			45º-60º	-
			>60º	1

Tabla 35 (metales homodinucleares)

Para los compuestos con metales heterodinucleares, recogidos en la Tabla 36, el valor predominante es el de >60º por lo que sus deformaciones son altas o muy altas como en el caso de los compuestos homodinucleares.

METAL	Nº FRAGMENTOS	DEFORMACIÓN MEDIA	DISTRIBUCIÓN	
			DEFORMACIÓN	Nº FRAGMENTOS
Cd - Ag	6	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	1
			45º-60º	3
			>60º	2
Bi - K	5	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	-
			45º-60º	2
			>60º	3
Hg - K	2	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	-
			45º-60º	-
			>60º	2
Cd - Cs	2	36º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	2
			45º-60º	-
			>60º	-
Cu - Ba	1	>60º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	-
			45º-60º	-
			>60º	1
Ag - Co	1	45º	<15º	-
			15º-30º	-
			30º-45º	1
			45º-60º	-
			>60º	-

Tabla 36 (metales heterodinucleares)

III.3.- Parámetros Químicos

III.3.1.- Distancia N–C y C–S.

Las distancias de enlace N–C y C–S de los 36 (78) fragmentos seleccionados se han medido con la ayuda del programa *Mercury*, y los datos se han recopilado en las Tablas 37 y 38. A partir de éstos se obtienen los valores medios para las diferentes clasificaciones establecidas (grupo funcional, tipo de enlace y combinación de ambas) según se muestra en la Tabla 37.

	Nº fragmentos	N–C (Å)	C–S (Å)
TIOCIANATO N=C=S	11 (31)	1.253 (1.106)	1.651 (1.642)
TIOCIANATO N≡C–S	18(32)	1.147(1.156)	1.645(1.643)
ISOTIOCIANATO N=C=S	5 (5)	1.145 (1.148)	1.638 (1.640)
ISOTIOCIANATO N≡C–S	2(10)	1.130(1.148)	1.637(1.642)
N=C=S	16(36)	1.199(1.127)	1.644(1.641)
N≡C–S	20(42)	1.139(1.152)	1.636(1.643)
TIOCIANATO	29(63)	1.200(1.131)	1.648(1.642)
ISOTIOCIANATO	7(15)	1.138(1.148)	1.632(1.641)

TABLA 37

Con estos datos se observa que:

- La diferencia entre las distancias de enlace N–C y C–S para ambas funciones es mínima. **Ahora hay una disminución en la N-C para los tiocianatos: 1.253 a 1.106 Å.**
- Si comparamos los fragmentos atendiendo al tipo de enlace, N=C=S y N–C≡S, los valores son muy parecidos.
- El grupo que resalta sobre los demás es el tiocianato N=C=S, sobre todo en el enlace N–C que es mucho más largo que en los isotiocianatos. El enlace C–S es ligeramente más largo que los demás.

Todo ello se resume en que no hay una diferencia significativa entre las distancias para distinguir entre enlaces N=C=S o N–C≡S, como definen algunos autores. Además tampoco hay diferencias entre ambos grupos funcionales.

La diferencia más considerable es que en la nueva búsqueda la función $N\equiv C-S$, tanto para tiocianato e isotiocianato, sus enlaces son los más largos. Anteriormente los mayores enlaces se daban en la función $N=C=S$.

Todo ello se resume en que no hay una diferencia significativa entre las distancias para distinguir entre enlaces $N=C=S$ o $N-C\equiv S$, como definen algunos autores. Además tampoco hay diferencias entre ambos grupos funcionales.

TIOCIANATOS $N\equiv C-S$			TIOCIANTOS $N=C=S$		
Refcode	N-C (Å)	C-S (Å)	Refcode	N-C (Å)	C-S (Å)
AKANEF	1.155	1.648	BAKHOL	1.144	1.633
	1.163	1.641		1.155	1.627
GOBDUW	1.141	1.666	BAKHUR	1.507	1.593
	1.167	1.641		1.164	1.656
GOBFEI	1.158	1.641	BAZCIO	-----	----
	1.150	1.652		----	----
GOBFEI01	1.146	1.641	IPAHEM	1.153	1.643
	1.152	1.637		1.153	1.643
KAMROF	1.136	1.632	JAVPAX	1.190	1.631
	1.136	1.632		1.117	1.697
NAHXEZ	1.150	1.643	JUCVEI	1.155	1.655
	1.159	1.651		1.145	1.650
RALFUF	1.155	1.624	NUMRAO	1.144	1.637
	1.156	1.633		1.141	1.653
TUKVAW	1.119	1.680	RAPVAF	1.141	1.658
	1.270	1.617		1.141	1.658
VUYZEU	1.156	1.646	RAPVAF01	----	----
	1.168	1.659		----	----
YUMCIS	1.148	1.648	RAPVEJ	1.159	1.640
	1.148	1.648		1.143	1.657
ZONWEE01	1.140	1.591	SESBAT	1.133	1.640
	1.172	1.628		1.133	1.640
ZONWEE	1.320	1.486	SIWZIH	1.141	1.645
	1.050	1.743		1.137	1.636
DUFFIU	1.196	1.633	ZIFLAB01	1.152	1.637
	1.141	1.630		1.186	1.527
ELEXAV	1.144	1.639	BUYDAB	1.153	1.641
	1.148	1.659		1.147	1.675
ELOTEF	1.142	1.613	JEYXER	---	---
	1.142	1.613		---	---
IFAFOL	1.150	1.660	KUBMAW	1.142	1.650
	1.159	1.642		1.150	1.646
ISUMUF	1.144	1.667	NUSRUP	1.138	1.667
	1.147	1.666		1.147	1.647
KUYMIB	1.152	1.643	SUJMUG	1.135	1.662
	1.153	1.636		1.135	1.653

PEMPED	1.171	1.662	SUJNAN	1.153	1.649
	1.166	1.669		1.152	1.641
VOMBIJ	1.144	1.696	SUJNER	1.39	1.646
	1.139	1.644		1.158	1.645
			SUJNIV	1.154	1.637
				1.151	1.643
			TAZYAV	1.55	1.633
				1.157	1.637
			TIMXOD	1.192	1.602
				1.186	1.617
			TUXZOC	1.139	1.644
				1.137	1.649
			KUBMEA	1.152	1.649
				1.155	1.649

TABLA 38

ISOTIOCIANATO $N\equiv C-S$			ISOTIOCIANATO $N=C=S$		
Refcode	N-C (Å)	C-S (Å)	Refcode	N-C (Å)	C-S (Å)
FEGFEC	----	----	DETQIC	1.158	1.634
	----	----		1.148	1.637
LETLIF	1.150	1.637	DETQOI	1.155	1.651
	1.137	1.622		1.155	1.651
ZIFLAB	1.142	1.633	WETRIW	1.137	1.633
	1.126	1.592		1.137	1.633
PAGTAT	1.151	1.650			
	1.156	1.654			
PAGTEX	1.150	1.653			
	1.151	1.667			
PAGTOH	1.151	1.645			
	1.150	1.652			
RAPVAFO2	1.155	1.656			
	1.155	1.656			
WAJHUL	1.153	1.632			
	1.151	1.632			

TABLA 39

III.3.2.- Distancia entre metales

Vamos a estudiar la relación entre la deformación de las estructuras y la distancia metal-metal, realizando también una comparación entre tiocianatos e isotiocianatos y el resto de compuestos. Para ello utilizamos los datos de los fragmentos de cadmio, que es el metal más abundante. Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 40.

Distancia Cd-Cd(Å)	Deformación (°)	Distancia Cd-Cd(Å)	Deformación (°)
5.576	>60	5.434	>60
5.576	56	5.411	36
5.572	52	5.393	>60
5.518	56	5.385	>60
5.508	33	5.381	40
5.506	35	5.373	35
5.442	>60	5.361	42
5.494	----	5.448	----
5.405	----	5.510	----
5.413	----	5.449	----
5.534	----	5.440	----
5.452	----	5.586	----

Tabla 40.- Relación distancia (Cd.Cd)-deformación para tiocianatos e isotiocianato

VALOR MEDIO DE CONFORMACIONES CABEZA-CABEZA

2006	57°	5.459 Å
2012	----	5.465 Å

Las variaciones producidas entre ambas búsquedas son mínimas.

VALOR MEDIO DE CONFORMACIONES CABEZA-COLA

45.2°	5.468 Å
-------	---------

Como conclusión, podemos afirmar que:

- En la conformación cabeza-cabeza el metal más abundante es el cadmio que sólo presenta las funciones tiocianato e isotiocianato. En la conformación cabeza-cola el metal más abundante es el cobre, que tiene otras funciones además de las anteriores.

- Las distancias cadmio-cadmio permanecen estables aunque la deformación de la molécula varíe. Por el contrario, en la conformación cabeza-cola se percibe una leve disminución conforme aumenta la deformación.
- En los tiocianatos e isotiocianatos en disposición cabeza-cabeza hay enlaces metal-metal heterodinucleares, no existiendo ninguno en la conformación cabeza-cola.

En el Apéndice 3 se recoge:

- el número de compuestos y de fragmentos.
- *refcode*.
- tipo de enlace y pareja de átomos que intervienen en el mismo.
- conformación más probable.

IV.- CONCLUSIONES

IVa.- Conclusiones 2006

1. Se ha realizado en la CSD la búsqueda de compuestos que presentan anillos de 8 miembros con el fragmento N–C–S en disposición cabeza-cabeza, que comparados con los del fragmento en disposición cabeza-cola permite exponer que:
 - a) hay un total de 93 compuestos (193 fragmentos) en disposición cabeza-cabeza y un total de 308 compuestos (477 fragmentos) en disposición cabeza-cola que cumplen los requisitos del estudio.
 - b) existe una gran variedad de funciones químicas, destacando las funciones piridina-2-tiolato y tiocianato con mucha diferencia respecto de las restantes funciones, siendo también estas dos las más abundantes en fragmentos cabeza-cola.
 - c) existe una gran variedad de metales, siendo los más abundantes el platino y el cobre con 16 compuestos cada uno. La tercera parte de los compuestos son heterodinucleares. En disposición cabeza-cola el cobre con 81 compuestos y el cadmio con 40 son los mayoritarios y sólo hay tres compuestos heterodinucleares.
2. Se han clasificado las estructuras de los 193 fragmentos tomando como criterio su similitud con las 10 conformaciones teóricas del ciclooctano. Para ello se han utilizado dos programas que permiten establecer la probabilidad de las estructuras pertenezcan a una determinada conformación del ciclooctano. Además, uno de los programas proporciona la deformación de cada estructura respecto a la estructura teórica más probable.
3. La coincidencia de los resultados obtenidos en la aplicación de los dos programas es total. Esto permite sugerir su aplicación a anillos de 8 miembros con otras funciones e incluso a otros anillos de distinto número de miembros.

4. Ambas disposiciones de fragmentos NCS tienen porcentajes muy diferentes en sus conformaciones más abundantes mientras que en las restantes los resultados son similares.
5. La conformación más abundante para la disposición cabeza-cabeza es la *sofa*. Este resultado varía al estudiar solamente las funciones tiocianato e isocianato para las que la conformación predominante es la *boat chair*. Para el resto de conformaciones se observan diferencias en los porcentajes, excepto en la *boat boat*, que se mantienen.
6. No se han encontrado compuestos que presenten la configuración *crown ni chair*. La conformación más abundante es la *sofa* con el 34.8%. En la disposición cabeza-cola no hay *crown* y la más abundante es la *boat* con 42.6%.

En el cuadro adjunto se resumen los resultados para ambas configuraciones:

Cabeza-cabeza	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
NCS (total)	0 0%	34 18.5 %	64 34.8 %	13 7.15 %	0 0%	13 7.1%	18 9.8 %	15 8.2%	21 11.4 %	6 3.2%	184
Cabeza-cola	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
NCS (total)	0 0%	29 6.1%	28 5.9%	203 42.6 %	62 13.0 %	76 15.9 %	21 4.4 %	20 4.2%	27 5.7%	11 2.3%	477 100%

7. Se han encontrado 62 fragmentos que presentan enlace metal-metal, de los que el 43.8% tienen la configuración *sofa*. De los 180 fragmentos que presentan enlace metal-metal en la disposición cabeza-cola el 49.4% son *boat*.
8. Solamente hay cinco compuestos con enlace interno azufre-metal. Dos de ellos tienen también enlace nitrógeno-metal y otros dos un puente de azufre. Los compuestos cabeza-cola tienen 56 fragmentos con enlace interno azufre-metal y no tienen ninguno con el enlace nitrógeno-metal ni con puente de azufre.

9. Los valores medios de deformación para las funciones tiocianato e isotiocianato son elevados para las dos disposiciones, presentando la mayoría de las configuraciones una deformación mayor de 60° y las restantes por encima de 44° en ambos casos.
10. Desde el punto de vista de las distancias de enlace, la diferencia entre los compuestos definidos como $N=C=S$ o $N-C\equiv S$ no existe, ya que la media de los valores obtenidos es la misma para ambas disposiciones. Esta situación también se presenta en los compuestos en disposición cabeza-cola.
11. El metal más abundante, cadmio, sólo está presente en tiocianatos e isotiocianatos, con valores medios de 5.459 \AA para la distancia y 57° de deformación. Para estas mismas funciones, en la disposición cabeza-cola, los valores son 5.468 \AA y 45° , respectivamente, siendo el cobre el metal mayoritario.

IVb.- Conclusiones 2012

1. Se ha realizado en la CSD la actualización de la búsqueda de compuestos que presentan anillos de 8 miembros con el fragmento N–C–S en disposición cabeza-cabeza y la hemos comparado con la primera búsqueda obteniendo los siguientes resultados:
 - a) hay 172 compuestos (335 fragmentos) en disposición cabeza-cabeza que cumplen los requisitos del estudio y un total de 79 nuevos complejos.
 - b) existe una gran variedad de funciones químicas, destacando en ambas búsquedas la piridina-2-tiolato y la tiocianato.
 - c) ha aumentado en 7 nuevos la gran variedad de metales ya existente y siguen siendo los más abundantes el platino y el cadmio. Un tercio de compuestos son heterodinucleares, al igual que en la búsqueda de 2006.
 - d) el número de compuestos, estudiado desde el punto de vista de su función orgánica, se duplica en las funciones tiocianato, isotiocianato, lactamato y mercaptobenzotiazolato. Apenas crecen los compuestos de oxamidato, piridina-2-tiolato y pirimidina-2-tiolato y se triplican los compuestos de imidazolato y las funciones restantes.
2. Se han clasificado las estructuras de los 142 nuevos fragmentos utilizando el mismo criterio que en anterior PFC: su similitud con las 10 conformaciones teóricas del ciclooctano.
3. La conformación más abundante para todas las funciones sigue siendo la *Sofa*. Para las funciones estudiadas con mayor profundidad, tiocianato e isocianato, la conformación predominante es la *Boat chair*. Para el resto de conformaciones apenas se observan diferencias en los porcentajes. Se ha encontrado un compuesto que presenta la configuración *Chair* y sigue sin haber *Crown*.

4. Hay 37 fragmentos más que presentan enlace metal-metal lo que hace un total de 99. La configuración más abundante sigue siendo la *Sofá* con un 37.37%.
5. Solamente hay 8 compuestos con enlace interno azufre-metal, 4 más que en la búsqueda inicial de 2006. Dos de ellos tienen también enlace nitrógeno-metal; además hay un tercero que no tiene enlace S-M pero sí N-M. Hay 4 nuevos compuestos con un puente de azufre hasta un total de 6, que tienen también un puente de oxígeno. Ha aparecido un nuevo compuesto con un puente de OH.
6. Los enlaces N-C y C-S en la función $N\equiv C-S$, tanto para tiocianato e isotiocianato, son los más largos, invirtiendo el resultado de 2006 donde los mayores enlaces eran los de la función $N=C=S$.
7. Aparecen siete metales nuevos. El más abundante, el cadmio, sólo está presente en tiocionatos e isotiocionatos, con valores medios de 5.465 Å en la distancia Cd-Cd, que ha aumentado en 0.006 Å con respecto a la primera búsqueda.
8. Las variaciones en los porcentajes de todas las pseudorotaciones estudiadas son mínimas.

La conclusión más importante es que el considerable aumento del número de compuestos y fragmentos ha confirmado que los resultados apenas varían respecto al estudio realizado en 2006.

La no inclusión de las deformaciones de los nuevos fragmentos se puede justificar en que casi todas las estudiadas en su día estaban muy deformadas lo que desluce los resultados. Lo mismo se puede decir de no calcular los valores de probabilidad para $\sigma = 20^\circ$ a la hora de estudiar las pseudorotaciones: no aporta información adicional.

V.- BIBLIOGRAFÍA

- ¹ E.S. Raper, *Coord. Chem. Rev.*, **61**, 115 (1985).
- ² E.S. Raper, *Coord. Chem. Rev.*, **129**, 91 (1994).
- ³ E.S. Raper, *Coord. Chem. Rev.*, **153**, 199 (1996).
- ⁴ E.S. Raper, *Coord. Chem. Rev.*, **165**, 475 (1997).
- ⁵ NA Bell, W Clegg, SJ Coles, CP Constable, CP Harrington RW, MB Hursthouse, ME Light, C Sammon, MR Walker, *Inorgánica Chimica Acta* **357** (7): 2091 (2004).
- ⁶ ES Raper, JR Creighton, NA Bell, W Clegg, L Cucurull-Sanchez, *Inorgánica Chimica Acta* **277** (1998).
- ⁷ NA Bell, TN Branston, W Clegg, L. Parker, ES Raper, C Sammon, CP Constable, *Inorgánica Chimica Acta* **319** (2001).

- ⁸ CC Hadjikostas, H Alkam, Akrivos PD, ES Raper, JR Creighton, *Inorgánica Chimica Acta* **271** 195 (1998).
- ⁹ L. Casella, M. Gullotti and R. Vigano, *Inorg. Chim. Acta*, **1124**, 121 (1998).
- ¹⁰ M. Gullotti, P. Casello, A. Pinter, E. Suardi, P. Zanello and S. Mangani, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, **1979** (1989).
- ¹¹ D.R. Haynes and M.N. Whiehouse, in K.D. Rainsforth and G.P. Velo (Eds), *New Developments in Anti-Rheumatic Therapy*, Kluwer, Dordrech, **207** (1989).
- ¹² J. Reedijk, *Inorg. Chim. Acta*, **198**, 973 (1992).
- ¹³ S.S.G.E. van Boom and J. Reedijk, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **1397** (1993).
- ¹⁴ K.J. Barhnam, M.I. Djuran, P. Del Socorro Murdoch and P.J. Sadler, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, **721** (1994).
- ¹⁵ M.J. Bloemink and J. Reedijk, in H. Sigel and A. Sigel (Eds), *Metal Ions in Biological Systems*, Marcel Dekker, New York, **32**, 641 (1996).
- ¹⁶ A.R. Katrizky y J.M. Lagowski, *Advances in Heterocyclic Chemistry*, Academic Press, New York, **Vol. 2** (1963).
- ¹⁷ M.S.C. Flett, *J. Chem. Soc.*, **1** 347 (1953).
- ¹⁸ C.N. Rao y R. Venkataraghavan, *Spectrochim. Acta*, **18** 541 (1962).
- ¹⁹ J.L. Davidson, P.N. Preston y M.V. Russo. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **783** (1983).
- ²⁰ A.J. Deeming, K.I. Hardcastle, M.N. Meah, P.A. Bates, H.M. Dawes y M.B. Hursthouse, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **783** (1983).
- ²¹ A.J. Deeming, M.N. Meah, N.P. Randle y K.I. Hardcastle, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **783** (1998).
- ²² K. Umakosi, I. Kinoshita y S. Ooi. *Inorg. Chim. Acta*, **127** (1987).
- ²³ K. Umakosi, I. Kinoshita, Y. Fukui-Yasuta, K. Matsumoto, S. Ooi, H. Nakai y M. Shiro, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **815** (1989).
- ²⁴ A.J. Deeming, M.N. Meah, P.A. Bates y M. B. Hursthouse, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **235** (1988).
- ²⁵ A.J. Deeming, M.N. Meah, P.A. Bates y M.B. Hursthouse, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **2193** (1988).
- ²⁶ M.A. Ciriano, J.J. Pérez-Torrente, F. Viguri. F.J. Lahoz. L.A. Oro, A. Tiripichio y M. Tiripichio-Camellini, *J. Chem. Dalton Trans.* **1493** (1990).
- ²⁷ M.S. García, A. Sánchez, J.S. Casas and J. Sordo, *Inorg. Chim. Acta* **201**, 35 (1992).
- ²⁸ P.D. Cookson and E.R.T. Tiekink, *J. Crystallorg. Spectrosc. Res.* **23**, **273** (1993).
- ²⁹ E. C. Constable, C.A. Plamer and D.A. Tocher, , *Inorg. Chim. Acta* **176**, 57 (1990).
- ³⁰ J.A. Boyko, W. Furey Jr and R.A. Lalacette, *Acta Crystallogr. Sect C* **48**. 1608 (1992).

- ³¹ Y. Nakatsu, Y. Nakamura, K. Matsumoto and S. Ooi. , *Inorg. Chim. Acta* **196**. 81 (1992).
- ³² E.S. Raper, A.M. Britton and W Clegg. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **3341** (1990).
- ³³ I.A. Latham, G.J. Leigh, C.J. Pickett, G. Huttner, I. Jibrill and J. Zubieta. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1181** (1986).
- ³⁴ S.G. Rosenfield, S.A. Swedborg, S.K. Arora and P.K. Mascharak, *Inorg. Chem.* **25**, 2109 (1986).
- ³⁵ S.G. Rosenfield, H.P. Berends, L. Gelmini, D.W. Stephens and P.D. Mascharak, *Inorg. Chem.* **26**, 2792 (1987).
- ³⁶ F.A. Cotton, P.E. Fenwick and J.W. Fich III, *Inorg. Chem.* **17**, 3254 (1978).
- ³⁷ T.S. Lobana, R. Verma and A. Castineriras, *Polyhedron*, **17**, 3753 (1998).
- ³⁸ T.S. Lobana, R. Verma, G. Hundal and A. Castineiras. *Polyhedron*, **19**, 899 (2000).
- ³⁹ S. Wang, R.J. Staples and J.P. Fackel Jr. *Acta Crystallorg. Sect C* **50**, 889 (1994).
- ⁴⁰ J.H. Yamamoto, W. Yoshida and C.M. Jensen. *Inorg. Chem.* **30**, 1353 (1991).
- ⁴¹ K. Umakoshi, I. Kinoshita and S. Ooi. *Inorg. Chim. Acta.* **127** L 41 (1987).
- ⁴² M. Gupta, R.E. Cramer, K. Ho, C. Pettersen, S. Mishina, J. Belli and C.M. Jensen. *Inorg. Chem.* **34**, 60 (1995).
- ⁴³ S.R. Fletcher and A.C. Skapsi, *J. Chem. Soc. Dalton, Trans*, **635** (1972).
- ⁴⁴ D.C. Jicha y D.H. Busch, *Inorg. Chem.* **1** 872 (1962).
- ⁴⁵ D.H. Busch, J.A. Burke, D.C. Jicha, M.C. Thompson and M.L. Morris, *Adv. Chem. Ser.* **37** 125 (1963).
- ⁴⁶ M. Capdevila, P. González-Duarte, C. Foces-Foces, F. Hernández y M. Martínez-Ripoll, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, 2817 (1992).
- ⁴⁷ M. Capdevila, W. Clegg, P. Gonzalez-Duarte, B. Harris, I. Mira, J. Sola y I.C. Taylor, *J. Chem. Soc., Dalton Trans*, 2817 (1992).
- ⁴⁸ K.S. Wyatt, K.N. Harrison y C.M. Jensen, *Inor. Chem.* **31** 3867 (1992).
- ⁴⁹ G. López, G. Sánchez, G. García, J. García, A. Martínez, J.A. Hermoso y M. Martinez-Ripoll, *J. Organometal Chem.* **435**, 193 (1992).
- ⁵⁰ M.D. Santana, G. García, A. Rulete, M.C. Martínez de Arellano, G. López. *J. Chem. Soc. Dalton Trans* **619** (2000).
- ⁵¹ J.L. Serrano, J. Pérez, G. Sánchez, J.F. Martínez, G. López, E. Molins. *Transition Met. Chem.* **27** 105 (2002).
- ⁵² F.H. Allen; J.A.K. Howard & N.A. Pitchford. "Symmetry-Modified Conformational Mapping and Classification of the Medium Rings from Crystallographic Data. IV. Cyclooctane and Related Eight-Membered Rings". *Acta Cryst.* **B52** 882 (1996).
- ⁵³ A.G. Sharpe. "Química Inorgánica". Ed. Reverté. (1993).
- ⁵⁴ E. Giralt. "Introducción a la estereoquímica de los compuestos orgánicos". Ed. Reverté. (1984).
- ⁵⁵ D. Conklin; S. Fortier; J.I. Glasgow & F.H. Allen. "Conformational Analysis from Crystallographic Data using Conceptual Clustering". *Acta Cryst.* **B52** 535 (1996).
- ⁵⁶ J.B. Hendrickson. *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 7047 (1967).
- ⁵⁷ a) R. Bucourt. *Top. Stereochem.* **8**, 159 (1974). b) P.J. De Clercq, *Tetrahedron* **40**, 3729 (1984).
- ⁵⁸ a) E. Toromanoff. *Tetrahedron.* **36**, 2809 (1980). b) P.J. De Clercq, *Tetrahedron* **37**, 4277 (1981).
- ⁵⁹ H. Ogura, K. Furuhashi, Y. Harada, Y. Iitakallen, *J. Am. Chem. Soc.* **100**, 6733 (1978).

- ⁶⁰ a) J.Dale, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **5**, 1000 (1966) . b) J.Dale, *Top. Stereochem* **9**, 199 (1976). c) J.Dale *Acta Chem. Scand* **27**, 1115. (1973).
- ⁶¹ H. Ogura, K.Furuhata, H. Kuwano, M. Suzuki, *Tetrahedron* **37**, 165 (1981).
- ⁶² I.J. Bruno; J.C. Cole; P.R. Edgington; M Kessler; C.F. Macrae; P. McCabe; J. Pearson y R. Taylor. *Acta Cryst.* **B58**, 389 (2002).
- ⁶³ Hyperchem™ ; Hypercube Inc. : 1115 NW 4th Street, Gainesville, Florida 32601, USA.
- ⁶⁴ Perez J, Nolsoe K, Kessler, M, García L, Pérez E y Serrano J.L. *Acta Cryst.* **B61**, 585 (2005).
- ⁶⁵ Allen F.H y Motherwell W.D.S *Acta Cryst.* **B58**, 407 (2002).
- ⁶⁶ Zimmer M. *Coord. Chem. Rev.* **212**, 133 (2001).
- ⁶⁷ Allen F.H. y Taylor R. *Chem. Soc. Rev* **33**, 463 (2004).
- ⁶⁸ Orpen A.G. *Chem. Soc. Rev.* pp., 191 (1993).
- ⁶⁹ Meyer T.J. *Acc. Chem. Res.* **22**, 163 (1989).
- ⁷⁰ Vergara E, Casini A, Sorrentino F, Zava O, Cerrada E , Rigobello M.P, Bindoli A, Laguna M and Dyson P.J. *Chem. Med. Chem.*, **96**, 5 (2010). o luminiscentes (a) Aslanidis P, Cox P.J and Tsaliki P, *Polyhedron*, **27**, 3029 (2008), b) Kaltzoglou A, Cox P.J and Aslanidis P, *Inorg. Chim. Acta*, **358**, 3048 (2005).
- ⁷¹ Serrano J.L, García L, Pérez J, Pérez E, García J, Sánchez G, López G and Liu M, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 4797 (2008).
- ⁷² Santana M.D, García-Bueno R, García G, Sánchez G, García J, Pérez J, García L and Serrano J.L. *Dalton Transactions*, **40**, 3537-3546 (2011).

APÉNDICES

Apéndice 1:

Ángulos de torsión de los compuestos obtenidos en la búsqueda de la CSD.

<i>Refcode</i>	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
AFUROI	-15.43	-3.309	-74.138	106.772	-10.79	-4.589	-81.224	123.58
AFUROI	-14.645	-1.913	-77.822	106.321	-11.532	-2.772	-84.215	120.412
AFUTUQ	-173.193	170.733	12.564	-14.785	-164.39	-178.835	0.537	-3.148
AKANEF	-145.014	-173.265	-71.484	55.094	-157.774	160.656	-38.564	8.35
ASIPAT	-11.426	10.304	88.261	-93.406	2.805	-1.805	88.06	-82.206
BAKHOL	-159.957	-177.062	-62.755	60.689	136.29	-154.671	-22.317	19.206
BAKHUR	173.06	-178.173	-51.507	65.49	-148.055	109.646	-9.772	38.104
BAKHUR	179.517	159.985	63.409	-59.839	-127.069	142.187	32.883	-24.814
CATNIU10	-5.664	-38.822	-35.17	105.711	-25.608	-10.372	-56.596	118.647
CIPKAN	2.788	-4.398	-163.571	172.498	-1.128	-3.777	-173.715	-178.3
CIPKAN	7.956	-8.936	-155.996	165.596	0.108	-3.986	-162.463	166.668
CUPGUQ	-11.498	-17.139	105.537	-51.268	-39.869	10.941	101.304	-61.859
CUPHIF	8.717	19.563	63.147	-104.692	15.831	9.209	63.367	-106.445
CUPHOL	7.159	20.446	62.96	-104.659	14.882	10.951	62.439	-105.527
CUPHUR	5.321	21.986	-107.413	52.619	33.297	-3.82	-106.553	67.454
DEBKIE	11.298	-8.895	-89.652	93.503	2.756	-5.505	-82.336	80.862
DEBQUX	-2.474	28.397	56.024	-121.247	35.626	-8.339	71.376	-107.288
DEBTOU	18.731	-30.547	-72.27	104.851	-10.09	-2.529	-79.278	88.539
DEBTOU	-10.138	-3.251	104.107	-80.683	-10.09	-2.529	103.76	-71.559
DEBTOU	-10.138	-3.251	-160.805	-167.282	-30.547	18.731	-160.793	177.849
DETQIC	125.481	-139.098	22.365	-7.602	29.146	-81.031	56.772	-16.092
DETQIC	174.567	-155.299	-25.193	17.333	103.791	-81.031	-30.667	5.954
DETQOI	175.446	-132.226	-33.625	14.252	44.546	0	-45.669	-10.182
DIFROA	8.298	32.219	-90.789	75.494	-19.468	-4.07	106.76	-122.721
DUFFIU	152.326	161.98	54.417	-46.36	166.822	-155.915	4.427	17.6
EHAPUY	3.533	-24.661	-58.413	93.602	-7.676	-7.499	-76.844	105.263
EJAKOP	8.123	17.11	63.292	-115.989	17.705	6.562	66.06	-115.926
EJAKOP	19.687	7.722	66.628	-116.769	23.619	-2.426	72.259	-123.518
EJAKUV	10.308	14.964	-114.622	61.818	17.413	10.074	-118.004	63.203
EJAKUV	4.929	20.072	-118.052	62.515	16.713	9.502	-117.148	65.768
FANFUV	174.485	179.895	-4.089	5.994	173.096	178.676	-1.726	4.779
FANFUV	-165.843	179.541	4.411	-7.46	-168.869	176.32	7.43	-11.65
FAWJIW	13.082	16.693	58.651	-121.949	21.755	8.257	58.363	-121.075
FAWJIW	17.117	11.959	2.324	-61.096	21.755	8.257	-75.905	12.621
FAWJIW	17.117	11.959	63.209	-119.588	16.693	13.082	57.741	-121.668
FAWJOC	-1.44	-20.889	114.506	-58.912	-19.766	-9.245	122.172	-68.668
FAWJOC	-2.381	-21.5	-62.073	113.679	-14.241	-12.457	-62.455	111.465
FAWJUI	-16.645	-10.141	113.017	-57.028	-24.942	-2.43	114.209	-59.794
FAWJUI	-8.991	-15.554	114.396	-63.336	-16.829	-8.426	115.667	-68.026

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
FEGFEC	134.814	-109.812	-60.267	72.955	-99.665	74.252	-22.254	13.668
FEJZEZ	3.47	24.45	56.974	-124.103	28.177	0.204	63.674	-112.957
FEJZEZ	11.112	18.827	-97.386	30.944	28.177	0.204	-42.42	-12.892
FEJZEZ	10.464	19.734	-121.345	55.192	28.177	0.204	-111.528	56.685
FEJZEZ	11.112	18.827	57.658	-122.394	24.45	3.47	61.543	-119.072
FEJZEZ	10.464	19.734	-74.805	10.444	24.45	3.47	-13.748	-42.632
FEJZEZ	10.464	19.734	58.04	-121.63	18.827	11.112	56.227	-117.966
FELBON10	-0.654	2.529	86.483	-87.962	2.817	-4.519	97.039	-93.724
FETCAI	9.502	14.065	-58.342	11.56	17.83	3.117	168.539	145.939
FETCAI	9.384	12.106	67.664	-111.529	17.83	3.117	72.41	-115.16
FETCAI	3.219	17.531	-111.619	65.236	17.83	3.117	-111.914	71.719
FETCAI	9.384	12.106	-109.159	64.731	14.065	9.502	-117.874	68.167
FETCAI	3.219	17.531	65.324	-112.083	14.065	9.502	66.376	-111.57
FETCAI	3.219	17.531	-6.956	-36.98	12.106	9.384	140.192	176.413
FETCEM	5.366	19.045	60.723	-114.155	19.045	5.366	67.448	-116.622
FETCEM	5.366	19.045	-26.716	-26.716	19.045	5.366	155.413	155.413
FETCEM	5.366	19.045	-114.155	60.723	19.045	5.366	-116.622	67.448
FETCEM	5.366	19.045	60.723	-114.155	19.045	5.366	67.448	-116.622
FIQQAY	5.614	-1.149	-138.482	139.916	-2.515	-1.18	171.571	-174.014
FIQQIG	-8.885	14.351	-157.667	145.311	1.298	-1.519	128.445	-128.995
FIQQOM	-5.16	2.123	131.495	-131.822	0.316	1.209	172.824	-169.875
FISHIZ	1.71	-59.268	118.297	-118.297	59.268	-1.71	-85.695	85.695
FOPJAV	2.841	10.243	-101.747	71.509	18.755	-5.215	-99.788	80.443
FOPJAV	1.714	13.71	71.395	-102.197	9.851	2.973	79.14	-105.191
FOPJEZ	-7.424	-16.818	-63.793	114.501	-19.793	-2.547	-71.154	115.484
FOWDIE	-1.033	1.468	88.909	-92.453	3.255	-2.603	90.092	-89.928
FOWDIE	1.074	-2.533	94.761	-92.633	0.419	0.576	86.537	-86.453
GALXAS	-8.399	-24.332	117.378	-44.415	-34.553	-1.009	118.999	-55.726
GOBDUW	-122.079	158.795	-15.949	6.018	-165.507	176.393	-5.778	-25.739
GOBFEI	140.742	-127.619	-59.372	65.093	-169.481	140.918	-19.51	27.612
GOBFEI01	169.388	-154.344	-59.718	63.761	-179.252	154.965	-20.983	26.425
GODLOB	-2.208	9.366	170.637	170.637	9.366	-2.208	-4.891	-4.891
GOXGUV	-39.148	45.763	63.843	-60.264	-49.166	37.908	75.482	-72.777
GOXGUV	-39.148	128.956	-68.829	68.836	-130.686	37.908	75.482	-72.777
GOXGUV	38.062	-48.933	-60.7	64.523	44.798	-38.244	-72.705	75.273
GOXGUV	38.062	-131.007	68.895	-69.753	128.639	-38.244	-72.705	75.273
IFAFOL	147.276	-178.996	66.607	-66.062	-157.247	-172.987	11.924	-12.133
IFAFOL	136.388	-150.085	62.642	-58.885	166.244	-154.057	31.941	-28.957
IPAHEM	-125.408	160.301	-70.71	70.71	-160.301	125.408	-8.468	8.468
IXUFIQ	-4.296	-23.546	-58.501	120.998	-23.546	-4.296	-61.312	111.47
IXUFIQ	-4.296	-23.546	120.998	-58.501	-23.546	-4.296	111.47	-61.312
IXUFIQ	-4.296	-23.547	31.251	31.247	-23.546	-4.296	25.079	25.079
IXUFIQ	-4.296	-23.547	-58.501	120.998	-23.546	-4.296	-61.312	111.47
IXUFOW	11.159	16.778	61.708	-117.751	16.778	11.159	58.906	-117.228

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
IXUFOW	11.159	16.778	-117.751	61.708	16.778	11.159	-117.228	58.906
IXUFOW	11.159	16.778	-28.022	-28.021	16.778	11.159	-29.161	-29.161
IXUFOW	11.159	16.778	61.708	-117.751	16.778	11.159	58.906	-117.228
IXUGAJ	-8.82	-12.142	108.987	-69.023	-12.142	-8.82	112.065	-68.656
IXUGAJ	-8.82	-12.142	-69.023	108.987	-12.142	-8.82	-68.656	112.065
IXUGAJ	-8.82	-12.142	19.982	19.982	-12.142	-8.82	-158.296	-158.296
IXUGAJ	-8.82	-12.142	108.987	-69.023	-12.142	-8.82	112.065	-68.656
IXUGEN	4.453	19.038	-114.153	63.511	19.038	4.453	-111.634	67.311
IXUGEN	4.453	19.038	63.511	-114.153	19.038	4.453	67.311	-111.634
IXUGEN	4.453	19.038	-25.321	-25.321	19.038	4.453	-22.162	-22.161
IXUGEN	4.453	19.038	-114.153	63.511	19.038	4.453	-111.634	67.311
JAMPAO	1.592	44.56	32.259	-105.613	24.895	13.343	53.228	-116.094
JAVPAX	157.657	-98.769	38.4	-75.314	-168.135	-137.619	6.603	-76.595
JIRQOR	-7.203	4.811	91.658	-94.464	2.99	-2.001	87.104	-82.846
JOSCOJ	0.02	-26.899	-63.483	120.032	-24.867	1.224	-62.736	100.006
JOSCOJ	-11.781	-9.619	112.391	-65.034	-24.867	1.224	97.55	-58.804
JOSCOJ	0.661	-31.285	-162.884	-132.697	-24.867	1.224	6.199	34.458
JOSCOJ	-11.781	-9.619	-159.678	-151.374	-26.899	0.02	38.324	2.976
JOSCOJ	0.661	-31.285	-55.638	120.952	-26.899	0.02	-57.029	103.163
JOSCOJ	0.661	-31.285	129.428	-71.906	-9.619	-11.781	96.42	-54.408
JUCVEI	33.803	-91.852	14.247	8.719	-112.247	74.183	14.228	44.231
KALPAP	2.954	-53.95	121.924	-121.924	53.95	-2.954	2.791	-2.791
KAMROF	-173.712	158.577	59.672	-59.672	-158.577	173.712	26.669	-26.669
KAXZUE	-0.267	95.107	-67.575	-68	94.692	1.562	-39.827	-36.579
KAZMEE	1.142	-0.393	-150.26	147.371	2.467	-0.351	-70.427	67.609
KEWVEN	-8.186	-20.44	-56.797	128.406	-30.485	-0.13	-60.911	117.31
KEWVEN	10.902	18.908	59.325	-118.274	17.717	10.261	60.458	-120.604
KEWVEN	-6.019	-24.231	45.767	27.232	-30.485	-0.13	58.717	-1.185
KEWVEN	14.422	16.222	-153.007	93.655	17.717	10.261	7.285	-69.739
KEWVEN	-11.317	-16.768	117.222	-51.41	-30.485	-0.13	116.287	-58.855
KEWVEN	11.159	20.14	-123.718	60.68	17.717	10.261	-116.381	56.291
KEWVEN	-6.019	-24.231	-55.403	120.354	-20.44	-8.186	-59.427	118.588
KEWVEN	14.422	16.222	58.922	-120.726	18.908	10.902	56.802	-122.911
KEWVEN	-11.317	-16.768	-56.628	117.055	-20.44	-8.186	23.567	35.052
KEWVEN	11.159	20.14	-31.764	-32.62	18.908	10.902	-13.317	-50.915
KEWVEN	-11.317	-16.768	-59.929	124.498	-24.231	-6.019	-58.63	117.976
KEWVEN	11.159	20.14	56.335	-120.033	16.222	14.422	53.977	-121.013
KEWVIR	11.149	15.703	-117.402	63.043	15.703	11.149	-117.927	61.06
KEWVIR	11.149	15.703	63.043	-117.402	15.703	11.149	61.06	-117.927
KEWVIR	11.149	15.703	152.82	152.821	15.703	11.149	-28.433	-28.433
KEWVIR	11.149	15.703	-117.402	63.043	15.703	11.149	-117.927	61.06
KEWVOX	-2.827	-23.149	120.964	-60.584	-23.149	-2.827	110.166	-63.321
KEWVOX	-2.827	-23.149	-60.584	120.964	-23.149	-2.827	-63.321	110.166
KEWVOX	-2.827	-23.149	-149.81	-149.81	-23.149	-2.827	23.422	23.423
KEWVOX	-2.827	-23.149	120.964	-60.584	-23.149	-2.827	110.166	-63.321

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
KUBMAW	152.796	164.863	76.277	-62.032	9.335	2.771	28.559	-7.116
KUBMEA	-59.393	76.482	-63.98	76.402	-170.952	130.146	-8.1	25.124
KUDJAV	178.845	177.323	3.029	-2.412	-179.051	179.151	0.609	0
KUJFAX	-12.057	-69.107	67.162	-108.179	123.336	-7.571	-86.041	126.598
KUNZIC	-8.479	83.762	-128.471	126.36	-76.911	5.341	153.463	-148.987
KUNZIC10	-8.479	83.762	-128.471	126.36	-76.911	5.341	153.463	-148.987
LETLIF	-99.534	109.463	-57.339	54.138	-160.91	156.99	-33.948	32.432
MEKDUC	-8.63	-87.349	48.838	55.103	-89.673	-13.875	50.891	44.744
MIKRAA	2.327	-0.703	-93.866	90.628	3.39	-4.76	-85.376	84.086
MIKRAA	-1.43	2.85	88.244	-99.919	9.056	-5.999	85.773	-90.066
MOQWIZ	-5.725	-71.565	62.385	-102.87	121.942	-6.239	-87.44	124.94
MOQWIZ	1.871	71.381	-59.112	97.106	-121.083	7.56	88.707	-123.004
MRIMCU	-7.899	-27.645	104.439	-109.234	28.655	6.172	28.246	-31.439
MRIMCU	-7.899	44.549	-111.163	106.254	-36.607	6.172	28.246	-31.439
MRIMCU	0.78	-31.639	101.075	-106.939	43.482	-10.37	79.78	-79.355
MRIMCU	0.78	36.848	-103.908	93.539	-22.454	-10.37	79.78	-79.355
NAHXEZ	136.334	175.635	-37.478	78.51	-159.988	104.323	-13.022	70.469
NAHXEZ	94.87	-169.872	80.235	-23.453	-159.988	104.323	62.152	3.754
NAHXEZ	94.87	-169.872	-16.159	61.561	175.635	136.334	-20.145	81.739
NAXWUF	12.008	11.119	-111.311	69.089	8.783	15.275	-117.458	65.488
NAXWUF	11.075	15.531	62.846	-112.198	9.38	15.852	60.549	-118.271
NILKAV	-3.521	84.071	-61.106	-85.338	74.211	7.939	-11.12	-87.061
NIRJED	-6.463	7.122	-83.747	95.252	-2.685	-9.265	-62.957	84.794
NIRJED	-6.463	-68.155	76.843	-73.927	66.019	-9.265	-62.957	84.794
NOKPUY	4.445	-27.115	-59.438	114.196	-13.373	-11.889	-62.254	108.477
NOKPUY	1.086	-26.695	121.034	-63.617	-13.493	-12.09	119.026	-69.535
NOKPUY	-9.253	-17.188	116.529	-59.074	-22.539	-3.552	114.644	-62.741
NOKPUY	-13.396	-13.567	-62.224	115.691	-20.011	-4.646	-67.472	120.943
NOKQAF	3.807	-25.287	-61.213	114.361	-15.721	-9.287	-63.787	107.743
NOKQAF	4.35	-27.762	120.065	-63.223	-17.145	-7.652	114.513	-72.5
NOKQAF	-10.068	-18.146	117.772	-60.25	-21.944	-5.105	114.603	-60.393
NOKQAF	-3.766	-22.285	-59.635	116.941	-22.438	-3.458	-67.233	114.455
NOQYOH	-6.576	104.385	-94.178	99.87	-125.407	25.909	81.568	-117.729
NUMRAO	131.634	-151.94	62.264	-60.682	157.079	-141.038	24.549	-21.01
OJOVAK	-178.85	174.005	11.567	-9.909	-163.82	-179.794	-4.825	-1.066
PAFCUU	2.353	-13.79	110.187	-85.622	-12.018	5.024	-165.425	178.176
PAGTAT	-176.036	169.815	-49.376	51.452	-34.522	35.114	-35.648	41.675
PAGTEX	-148.773	177.214	-19.643	5.748	164.632	-126.181	-36.074	-8.813
PAGTEX	-137.162	164.851	-9.083	8.734	82.027	-126.181	51.411	-33.598
PAGTEX	-62.626	119.54	-30.853	8.823	-147.368	-165.169	-40.293	-27.006
PAGTEX	73.895	-121.174	40.55	-17.611	114.552	-165.169	51.739	11.148
PAGTEX	-152.467	-162.859	-17.065	-1.128	164.361	-122.621	-31.173	-23.74
PAGTEX	168.668	175.145	25.527	-11.675	71.743	-122.621	58.079	-10.873
PAGTOH	170.883	-144.529	-6.402	-5.451	169.659	-139.123	-22.073	-13.804
PAKLIW	3.997	-24.85	113.419	-56.358	-30.838	6.152	110.884	-72.13

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
PAKLIW	1.743	-28.446	-55.78	118.015	-30.838	6.152	-69.818	112.225
PAKLIW	-5.712	-15.174	-18.134	70.66	-30.838	6.152	107.712	-67.507
PAKLIW	1.743	-28.446	75.164	-17.359	-24.85	3.997	-146.165	-173.738
PAKLIW	-5.712	-15.174	109.062	-62.844	-24.85	3.997	107.705	-70.683
PAKLIW	-5.712	-15.174	-65.629	120.77	-28.446	1.743	-67.646	110.019
PATKIE	6.218	23.419	-125.212	63.443	16.112	14.769	-117.619	58.973
PATKIE	-3.335	-25.16	125.705	-55.925	-19.894	-11.274	121.057	-62.147
PATKIE	24.052	8.579	-80.867	25.96	16.112	14.769	-83.886	11.611
PATKIE	6.95	-31.521	-103.59	171.914	-19.894	-11.274	91.139	-39.706
PATKIE	6.996	23.49	56.99	-117.775	16.112	14.769	54.536	-118.377
PATKIE	-13.713	-17.427	-61.153	121.173	-19.894	-11.274	-57.841	120.248
PATKIE	24.052	8.579	-118.344	52.544	23.419	6.218	-116.483	45.573
PATKIE	6.95	-31.521	124.261	-54.949	-25.16	-3.335	115.532	-69.554
PATKIE	6.996	23.49	166.275	125.464	23.419	6.218	-43.478	-16.113
PATKIE	-13.713	-17.427	30.964	33.549	-25.16	-3.335	2.654	55.513
PATKIE	6.996	23.49	-120.829	62.89	8.579	24.052	-126.732	56.21
PATKIE	-13.713	-17.427	119.531	-52.836	-31.521	6.95	109.326	-57.353
PATKIE01	3.163	25.024	-122.571	57.868	17.63	13.088	-121.818	61.843
PATKIE01	2.122	26.477	24.698	-90.318	17.63	13.088	-20.408	-38.45
PATKIE01	12.13	18.853	57.478	-121.251	17.63	13.088	54.563	-120.498
PATKIE01	2.122	26.477	-123.491	56.54	25.024	3.163	-114.188	62.91
PATKIE01	12.13	18.853	-66.511	1.409	25.024	3.163	-14.573	-44.074
PATKIE01	12.13	18.853	-121.655	55.638	26.477	2.122	-113.419	55.592
PEMPED	145.494	-123.29	-65.209	64.865	142.149	-165.451	-22.11	22.624
PESTOW	3.381	-60.164	106.223	-13.684	-55.619	-2.109	94.732	-28.379
PESTOW	8.905	-66.499	-10.511	105.318	-55.619	-2.109	-27.195	94.419
PESTOW	8.905	-66.499	111.966	-15.209	-60.164	3.381	94.648	-30.132
PEYLIP	92.196	-153.205	95.688	-67.352	-171.665	-176.486	7.795	17.082
PEYLIP	174.546	155.907	-52.04	57.405	-171.665	-176.486	-59.191	72.633
PEYLIP	174.546	155.907	73.527	-32.747	-153.205	92.196	87.181	-36.997
PIBFIQ	-5.523	-94.184	72.238	38.26	-99.992	-2.633	63.676	21.242
PILZOA	-4.646	20.269	36.948	-73.891	13.36	4.484	-10.22	-17.303
PILZOA	1.829	15.488	70.001	-107.673	13.36	4.484	71.719	-104.711
PILZOA	1.829	15.488	-109.408	70.737	20.269	-4.646	-99.261	73.115
PONLEK	-8.993	29.012	62.575	-112.296	22.303	-0.93	71.09	-101.52
PONLEK	-0.93	22.303	-23.722	-23.722	22.303	-0.93	-17.251	-17.251
PONLEK	-8.993	29.012	-114.933	64.822	22.303	-0.93	-105.547	74.741
PONLEK	-8.993	29.012	-26.197	-26.197	29.012	-8.993	-13.369	-13.369
PONLIO	-9.506	8.554	90.836	-91.42	-4.332	4.397	84.484	-81.042
PYMTMO	1.113	0.792	176.679	178.515	1.992	-0.514	176.365	179.498
PYMTMO	1.483	-1.565	-176.154	176.378	0.837	-0.46	-172.58	171.865
QKEGOC	-0.131	90.392	-58.8	-58.8	90.392	-0.134	-38.511	-38.511
QISCOK	9.817	12.624	-76.139	169.849	-64.697	-4.777	-10.173	43.314
QIXBOP	5.392	15.815	69.642	-110.633	15.815	5.392	69.958	-109.054
QIXBOP	5.392	15.815	-110.633	69.642	15.815	5.392	-109.054	69.958

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
QIXBOP	5.392	15.815	159.505	159.505	15.815	5.392	-19.548	-19.547
QIXBOP	5.392	15.815	69.642	-110.633	15.815	5.392	69.958	-109.054
QIXBUV	7.707	-29.629	-62.113	117.633	-28.251	4.145	-70.921	104.17
QIXBUV	2.626	-26.819	12.002	44.262	-28.251	4.145	16.97	20.668
QIXBUV	-7.342	-18.115	114.044	-60.906	-28.251	4.145	108.106	-64.684
QIXBUV	2.626	-26.819	-61.317	116.126	-29.629	7.707	-74.389	108.553
QIXBUV	-7.342	-18.115	79.166	-27.211	-29.629	7.707	59.277	-19.786
QIXBUV	-7.342	-18.115	-64.182	117.158	-26.819	2.626	-70.45	113.875
RALFUF	-161.18	168.302	9.174	-3.153	177.389	154.437	29.981	-20.985
RAPVAF	-177.18	144.638	69.814	-69.814	-144.638	177.18	13.243	-13.243
RAPVAF02	170.436	127.126	73.554	-73.554	-127.126	-170.436	-10.57	10.57
RAPVAF02	170.436	-135.825	-70.743	70.743	135.825	-170.436	-10.57	10.57
RAPVEJ	113.161	-133.232	61.392	-57.209	165.658	-157.376	32.133	-24.495
RIGMAV	169.776	174.285	4.565	-2.637	-178.467	-175.857	-8.294	9.912
RUQJUJ	-1.788	81.663	-66.638	103.332	-122.259	6.032	87.812	-119.215
SANMOK	-2.699	1.961	93.409	-95.307	6.475	-8.581	90.961	-83.506
SESBAT	-169.019	-162.138	-7.632	-7.632	-162.138	-169.019	-17.343	-17.343
SEZKEN	-10.162	8.851	173.411	178.31	10.715	-12.99	-177.556	-169.602
SEZKEN	9	-6.915	172.812	-169.062	-4.007	5.178	165.396	-174.453
SIWZIH	171.95	178.946	59.705	-65.033	-120.883	149.396	16.229	-29.479
TAZYAV	135.658	-123.278	-1.116	-1.116	-123.279	135.659	-9.404	-9.404
TAZYAV	-179.003	171.259	11.624	-13.593	168.508	-157.45	-3.81	2.648
TEFJUK	-1.499	-35.871	107.837	-110.477	40.644	-8.179	-9.962	14.836
TEFJUK	-1.499	34.98	-109.81	107.173	-24.421	-8.179	-9.962	14.836
TEFJUK	-3.654	39.728	-106.93	89.505	-13.017	-14.324	-135.005	134.818
TEFJUK	-3.654	-27.012	91.58	-106.481	51.913	-14.324	-135.005	134.818
TIMXOD	-173.635	107.375	17.156	-17.355	-105.56	172.482	-80.706	79.829
TOZVAF	2.527	-82.519	55.101	55.101	-82.519	2.527	34.005	34.005
TOZVAF	3.679	76.623	-54.56	-54.56	76.623	3.678	-37.492	-37.492
TUHLAK	-9.453	30.023	90.025	90.025	30.023	-9.453	-90	90
TUHLAK	-4.543	26.56	152.592	152.592	26.56	-4.543	-17.093	-17.092
TUHLEO	3.374	-26.865	-61.941	119.519	-32.154	10.736	-75.934	108.099
TUHLEO	10.736	-32.154	-150.104	-150.107	-32.154	10.736	13.939	13.939
TUHLEO	3.374	-26.865	118.355	-59.728	-32.154	10.736	103.805	-70.918
TUHLEO	3.374	-26.865	28.205	28.205	-26.865	3.374	18.589	18.589
TUHLOY	-6.411	29.235	-29.077	-29.077	29.235	-6.411	-16.796	-16.796
TUHLOY	-6.411	29.235	-118.855	60.702	29.235	-6.411	-106.444	72.852
TUHLOY	-6.411	29.235	60.702	-118.855	29.235	-6.411	72.852	-106.444
TUHLOY	-6.411	29.235	-118.855	60.702	29.235	-6.411	-106.444	72.852
TUHLUE	9.997	-31.518	28.87	28.87	-31.518	9.997	14.156	14.156
TUHLUE	9.997	-31.518	-59.266	117.005	-31.518	9.997	-74.202	102.514
TUHLUE	9.997	-31.518	117.005	-59.266	-31.518	9.997	102.514	-74.202
TUHLUE	9.997	-31.518	-59.266	117.005	-31.518	9.997	-74.202	102.514
TUHMAL	2.51	-24.766	-62.288	116.289	-31.29	11.295	-75.384	105.729
TUHMAL	16.369	-34.281	11.217	44.575	-31.29	11.295	20.335	1.304

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
TUHMAL	16.369	-34.281	-60.527	115.748	-24.766	2.51	-70.81	97.015
TUKVAW	-49.662	56.068	56.166	-79.858	133.582	-94.827	14.016	-45.429
VEKFEW	5.163	-30.621	-60.698	117.683	-22.865	-0.717	-66.319	104.407
VEKFEW	-0.717	-22.865	-153.133	-153.133	-22.865	-0.717	19.43	19.43
VEKFEW	5.163	-30.621	124.21	-63.919	-22.865	-0.717	104.768	-66.229
VEKFEW	5.163	-30.621	-148.24	-148.239	-30.621	5.163	18.894	18.894
VOMBIJ	-132.968	131.718	57.095	-80.63	100.06	-51.961	9.639	-33.937
VUYZEU	128.489	-147.285	-20.783	26.637	156.709	-171.148	-3.135	26.75
WAJHUL	173.49	-179.875	-47.671	51.496	179.488	174.459	-38.501	45.786
WAJHUL	167.299	-173.091	51.706	-47.776	179.488	174.459	45.491	-38.817
WAJHUL	167.299	-173.091	-47.615	51.641	-179.875	173.49	-38.117	45.056
WETRIW	-149.865	136.606	61.49	-61.49	-136.606	149.865	30.631	-30.631
WETRIW	-139.746	130.417	61.4	-61.4	-130.417	139.746	35.718	-35.718
WEXVIE	4.485	3.556	170.832	170.832	3.556	4.485	169.194	169.194
WEXVIE	8.265	-1.286	174.709	174.709	-1.286	8.265	169	169
WIVTIE	-173.954	-169.427	-10.44	9.951	173.78	176.729	4.37	-6.664
XUDKOX	10.679	10.035	-88.94	35.441	28.209	11.768	-128.028	67.67
YERZEA	-9.159	-22.821	-53.35	112.4	-29.816	-0.964	-67.183	114.873
YERZOK	6.949	15.861	67.336	-107.06	19.785	2.771	68.689	-104.858
YERZOK	-1.579	-17.49	105.212	-73.332	-10.766	-6.55	100.632	-71.859
YOFYIB	-3.973	-6.741	156.013	-146.43	-0.115	3.85	-148.617	155.958
YOFYIB	-4.381	0.827	-92.164	85.604	-0.115	3.85	-108.407	101.508
YOFYIB	-4.381	0.827	99.243	-75.921	-6.741	-3.973	115.706	-86.024
YOLVEB	-10.069	-4.844	103.49	-71.641	-16.844	0.223	105.029	-74.021
YOLVEB	0.223	-16.844	-160.119	-160.119	-16.844	0.223	-165.602	-165.601
YOLVEB	-10.069	-4.844	-77.603	111.396	-16.844	0.223	-76.316	107.841
YOLVEB	-10.069	-4.844	-167.067	-167.067	-4.844	-10.069	-163.121	-163.12
YUCDUV	-174.327	-168.639	-11.278	10.101	171.605	178.22	4.845	-5.819
YUMCIS	180	180	0	0	180	180	0	0
ZIFLAB	89.8	-33.557	-14.762	10.534	-156.449	155.761	1.111	-50.271
ZIFLAB01	147.389	-138.294	12.063	-14.254	-71.452	120.282	-43.042	-8.448
ZONWEE	-13.181	46.914	5.363	-3.133	-166.518	135.727	37.133	-55.384
ZONWEE	172.557	175.939	-15.275	6.403	-89.424	135.727	-57.878	37.885
ZONWEE	152.575	-150.062	32.562	-29.51	80.984	-105.195	44.95	-34.786
ZONWEE	124.996	-81.79	-29.864	2.749	153.022	-105.195	-42.995	-8.884
ZONWEE01	-41.746	53.739	19.137	-15.529	120.163	-148.049	41.234	-37.784
ZONWEE01	-177.223	-166.399	-22.701	4.667	-164.602	-148.049	-50.539	14.348
ZUDYIG	-46.594	-38.214	78.662	76.599	-39.378	-47.871	98.755	101.835
ZUDYOM	42.109	43.258	-79.188	-77.871	33.782	49.851	-103.668	-95.995
SUJMUG	158.279	-140.446	-63.439	66.16	125.156	-155.248	-16.627	23.654
SUJNAN	156.073	-137.858	-61.385	67.43	174.393	155.651	-16.199	23.93
SUJNER	165.163	155.535	70.807	-58.348	-140.638	149.082	29.502	-9.796
SUJNIV	-74.013	94.02	-63.09	64.635	153.307	-173.461	-22.571	25.752
BUYDAB	170.965	-163.108	41.993	-77.174	126.735	-47.297	-35.644	-9.028
KUYMIB	163.967	-167.489	39.053	-20.364	-108.49	52.755	77.274	-41.33

Refcode	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
NUSRUP	-153.358	-168.588	-74.238	48.431	166.439	-142.43	-54.407	23.28
NUSRUP	-88.714	129.36	43.58	-72.451	166.439	-142.43	31.655	-76.78
NUSRUP	-88.714	129.36	-74.254	45.846	-168.588	-153.358	-62.283	19.507
NUVYEJ	9.333	-51.108	112.864	-112.864	51.108	-9.333	165.855	-165.855
TUXZOC	-168.872	-144.191	-59.748	55.087	-95.581	54.867	22.944	-24.205
ELEXAV	133.306	179.401	69.056	-62.273	-115.1	157.627	-16.564	13.922
ELOTEF	172.019	164.552	-36.841	42.335	180	-180	-42.904	60.931
ELOTEF	-172.019	-164.553	-62.591	62.591	164.552	172.019	-26.894	26.894
ELOTEF	136.214	-128.18	49.177	-49.844	180	180	43.865	-50.576
ELOTEF	-136.216	128.182	54.449	-54.449	-128.18	136.214	37.364	-37.364
FABVUB	-2.995	0.502	-92.337	96.069	-3.279	3.537	-88.987	91.257
EMIZIK	3.518	11.887	-91.891	48.542	32.708	8.949	-100.266	57.502
IQATUQ	0.961	-11.021	97.166	-84.816	4.013	-5.911	-150.604	163.208
IQAVAY	-8.809	-0.305	73.825	-66.051	2.52	-4.426	-152.215	167.891
UNAVAH	0.997	-27.076	103.016	-103.016	27.076	-0.997	-30.426	30.426
ISUMUF	99.094	-142.544	-25.439	38.145	47.994	-82.347	7.402	51.438
ISUMUF	-83.489	53.715	58.025	-60.425	-96.739	152.04	-17.987	0.479
ISUMUF	-83.489	120.205	-61.405	57.111	-164.859	152.04	-17.987	0.479
ISUNAM	70.005	-99.355	-41.261	46.092	96.876	-90.158	-40.608	62.128
ISUNAM	78.021	-117.625	-43.183	59.233	31.253	-71.036	-9.651	57.968

Apéndice 2:

Resultados de los programas específicos

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
AFUROI -1	0.74 TCC 0.26 CC	0.56 TCC 0.44 CC 0.01 S	130 TCC4 131 CC4 146 S2
AFUROI -2	0.74 CC 0.24 TCC	0.57 CC 0.43 TCC	128 CC4 129 TCC4
AFUTUQ	1.00 BC	1.00 BC	264 BC3
AKANEF	1.00 BC	1.00 BC	250 BC7
ASIPAT	1.00 BB	0.85 BB 0.15 S	121 BB2 126 S2
BAKHOL	1.00 B	0.99 B 0.01 S	263 B 269 S2
BAKHUR -1	1.00 TC	1.00 TC	159 TC6
BAKHUR -2	1.00 B	1.00 B	261 B2
BAZIO	---	---	---
CATNIU	---	---	---
CATNIU10	1.00 B	0.88 B 0.12 S	116 B4 120 S1
CIPKAN -1	1.00 BC	1.00 BC	258 BC1
CIPKAN -2	1.00 CC	1.00 CC	183 CC4
CUPGUQ	1.00 S		
CUPHIF	1.00 S		
CUPHOL	1.00 S		
CUPHUR	1.00 S		
CUSHUT	---	---	---
DEBKIE	1.00 BB	0.85 BB 0.15 S	114 BB2 120 S2
DEBQUX	1.00 BC		
DEBTOU -1	0.22 BB 0.78 S		
DEBTOU -2	0.03 BB 0.97 S		
DEBTOU -3	1.00 BC		
DETQIC -1	1.00 TCC	0.81 TCC 0.19 CC	121 TCC6 126 CC6
DETQIC -2	0.55 BB 0.45 S	0.64 BB 0.36 S	183 BB2 183 S6
DETQOI	1.00 S	0.94 S 0.05 BB 0.01 B	165 S6 173 BB2 177 B3
DIFROA	1.00 TC		

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
DUFFIU	1.00 BC		
EHAPUY	1.00 S	0.73 S 0.27 BB	112 S2 118 BB2
EJAKOP -1	1.00 S	0.82 S 0.07 B 0.06 TCC 0.05 BB 0.01CC	132 S4 140 TCC8 141 B2
EJAKOP -2	1.00TCC	0.89 TCC 0.11 CC	122 TCC8 128 CC8
EJAKUV -1	1.00 S	0.84 S 0.11 B 0.04BB 0.01 TCC	130 S6 138 B3 141 BB2 143 TCC5
EJAKUV -2	0.93 S 0.07 TCC	0.57 S 0.30 TCC 0.08 B 0.03 CC 0.03 BB	136 S6 138 TCC5 143 B3 144 CC4
FANFUV -1	1.00 BB	0.94 BB 0.06 S	271 BB1 274 S1
FANFUV -2	1.00 CC	1.00 CC	200 CC2
FAWJIW -1	0.76 S 0.19 TCC 0.05 B	0.38 S 0.33 B 0.27 TCC 0.01 CC 0.01 BB	138 S4 139 TCC8 140 B2
FAWJIW -2	0.68 S 0.32 BB	0.55 BB 0.41 S 0.04 B	116 S1 117 BB1 125 B3
FAWJIW -3	0.86 S 0.13 TCC 0.01 B	0.46 S 0.29 TCC 0.24 B 0.01 CC 0.01 BB	137 S4 138 TCC8 141 B2
FAWJOC -1	0.72 S 0.28 TCC	0.48 S 0.38 TCC 0.08 B 0.03 CC 0.02 BB	137 S8 138 TCC1 144 B1 145 CC8
FOWJOC -2	1.00 S	0.89 S 0.06 BB 0.06 B	121 S1 132 BB2 132 B4
FAWJUI -1	1.00 S	0.87 S	116 S8

		0.10 B 0.04 BB	125 B1 129 BB4
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
FAWJUI -2	1.00 S	0.87 S 0.06 BB 0.05 B 0.02 TCC	130 S8 140 BB4 141 B1 142 TCC1
FEGFEC	---	---	---
FEJZEZ -1	0.67 S 0.32 BC	0.47 S 0.23 BC 0.19 B 0.10 TCC	137 S4 137 BC8 141 B1 141 TCC8
FEJZEZ - 2	1.00 B	0.99 B 0.01 S	95 S4 113 S1
FEJZEZ -3	1.00 S	0.72 S 0.27 B 0.02 BB	123 S6 128 B3 136 BB2
FEJZEZ -4	0.95 TCC 0.05 S	0.54 TCC 0.26 S 0.18 B 0.02 CC 0.01 BB	137 TCC8 139 S4 142 B2
FEJZEZ -5	0.98 S 0.02 BB 0.01 B	0.48 S 0.29 BB 0.23 B	106 S1 110 BB1 111 B3
FELBON	0.97 S 0.03 B	0.58 S 0.40 B 0.01 TCC 0.01 BB	131 S4 134 B2 144 TCC8 145 BB4
FELBON10	0.82 BB 0.18 CC	0.62 BB 0.25 CC 0.11 S 0.01 TCC	133 BB2 133 CC4 137 S6
FETCAI -1	1.00 BC	1.00 BC	223 BC3
FETCAI -2	0.96 TCC 0.03 S 0.01 CC	0.56 TCC 0.24 S 0.16 CC 0.03 BB 0.01 C	134 TCC8 137 S4 138 CC8
FETCAI -3	1.00 S	0.82 S 0.11 BB 0.02B 0.02 CC 0.01TCC	131 S6 139 BB2 141 B3 142 TCC5
FETCAI -4	1.00 S	0.87 S	130 S6

		0.08 BB 0.03 B 0.01 TCC	139 BBS 141 B3 142 TCC5
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
FETCAI -5	1.00 S	0.88 S 0.09 BB 0.03 B	125 S4 134 BB4 138 B2
FETCAI -6	0.99 BB 0.01	0.78 BB 0.22 S	225 BB3 227 S3
FETCEM -1	1.00 S	0.85 S 0.07 B 0.05 BB 0.02 TCC	131 S4 141 B2 141 BB4
FETCEM -2	0.99 BB 0.01 S	0.77 BB 0.23 S	225 BB3 227 S3
FETCEM -3	1.00 S	0.85 S 0.07 C 0.05 BB 0.02 TCC	131 S6 141 B3 141 BB2 142 TCC5
FETCEM -4	1.00 S	0.85 S 0.07 B 0.05 BB 0.02 TCC	131 S4 141 B2 141 BB4
FIQQAY	1.00 TC		
FIQQIG	1.00 TC		
FIQQOM	1.00 CC		
FISHIZ	1.00 TC		
FOPJAV -1	0.94 S 0.06 BB	0.55 S 0.45 BB	122 S6 125 BB2
FOPJAV -2	0.98 S 0.02 BB	0.62 S 0.37 BB	127 S4 131 BB4
FOPJEZ	0.90 S 0.10 TCC	0.55 S 0.31 TCC 0.06 CC 0.05BB 0.03 C	135 S2 137 TCC4 142 CC4
FOWDIE -1	0.99BB 0.01 CC	0.72 BB 0.14 CC 0.13 S 0.01 TCC	131 BB2 134 CC4 135 S2
FOWDIE -2	0.99 BB 0.01 CC	0.73 BB 0.14 S 0.13 CC 0.01 TCC	131 BB2 134 CC4 136 S2 136 S6

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
GALXAS	0.74 B 0.26 S	0.68B 0.31 S	124 B1 124 S8
GOBDUW	1.00 CC	0.99 CC 0.01 TCC	173 CC2 184 TCC2
GOBFEI	1.00 TC	0.98 TC 0.01 TBC 0.01 C	144 TC6 153 TBC13 157 C1
GOBFEI01	1.00 TC	1.00 TC	164 TC6
GODLOB	1.00 BB		
GOXGUV-1	1.00 BB	0.87 BB 0.13 S	40 BB4 53 S8
GOXGUV-2	1.00 BC	1.00 BC	93 BC10
GOXGUV-3	1.00 BB	0.87 BB 0.13 S	40 BB2 54 S2
GOXGUV-4	1.00 BC	1.00 BC	93 BC2
IFAFOL-1	1.00 BC		
IFAFOL-2	1.00 CC		
IPAHEM	1.00 CC	0.99 CC 0.01 TCC	116 CC2 135 TCC2 135 TCC7
IXUFIQ-1	1.00 S		
IXUFIQ-2	1.00 S		
IXUFIQ-3	0.99 BB 0.01 S		
IXUFIQ-4	1.00 S		
IXUFOW-1	1.00 S		
IXUFOW-2	1.00 S		
IXUFOW-3	0.99 BB 0.01 S		
IXUFOW-4	1.00 S		
IXUGAJ-1	1.00 S		
IXUGAJ-2	1.00 S		
IXUGAJ-3	0.99 BB 0.01 S		
IXUGAJ-4	1.00 S		
IXUGEN-1	1.00 S		
IXUGEN-2	1.00 S		
IXUGEN-3	0.98 BB 0.02 S		
IXUGEN-4	1.00 S		
JADYOC	---	---	---
JAMPAO	1.00 B	0.91 B	109 B2

		0.09 S	114 S4
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
JAVPAX	0.99 BC 0.01 TBC	0.77 BC 0.23 TBC	238 BC13 241 TBC1
JIRQOR	1.00 BB		
JESKOH	---	---	---
JONHUP	---	---	---
JOSCOJ -1	0.59 S 0.41 BC	0.52 S 0.32 BC 0.06 B	129 S2 139 B4
JOSCOJ -2	1.00 S	0.87 S 0.11 BB 0.02 B	112 S8 121 BB4 127 B1
JOSCOJ -3	0.96 S 0.04 BB	0.49 BB 0.48 S 0.02 B	217 S1 219 BB1 222 B3
JOSCOJ -4	0.87 S 0.13 BB	0.60 S 0.26 B 0.12 BC	222 S5 223 BB1 228 B2
JOSCOJ -5	0.98 S 0.01 BB	0.60 S 0.26 B 0.12 BC	127 S2 132 B4 140 BB2
JOSCOJ -6	1.00 TCC	0.92 TCC 0.07 CC	128 TCC1 136 CC8
JUCVEI	1.00 TBC	0.89 TBC 0.11 TC	125 TBC4 134 TC6
KALPAP	0.93 BC 0.07 TBC		
KAMROF	0.53 BC 0.47 BB	0.71 BB 0.26 BC 0.03 S	230 BC14 231 BB4 236 S4
KAXZUE	1.00 BB	0.86 BB 0.14 S	99 BB1 106 S1 106 S5
KAZMEE	1.00 CC		
KEWVEN-1	1.00 TCC	0.84 TCC 0.07 S 0.07 B 0.02 CC	136 TCC4 144 S2 145 B4
KEWVEN-2	1.00 S	0.70 S 0.26 B 0.02 TCC 0.02 BB	132 S4 137 B2 143 TCC8 145 BB4
KEWVEN-3	0.84 S	0.46 B	91 S3

	0.16 B	0.42 S 0.12 BB	93 B1 99 BB3
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
KEWVEN-4	1.00 TC	0.98 TCC 0.01 TBC	143 TC8 153 TBC16
KEWVEN-5	1.00 S	0.73 S 0.26 B 0.02 BB	120 S8 126 B1 134 BB4
KEWVEN-6	0.99 S 0.01 B	0.61 S 0.35 B 0.02 TCC 0.01 BB	133 S6 137 B3 143 TCC5 146 BB2
KEWVEN-7	0.99 S 0.01 B	0.65 S 0.64 B 0.01 BB	130 S2 134 B4 143 BB2
KEWVEN-8	0.92 S 0.07 B	0.47 S 0.42 B 0.10 TCC 0.01 BB	136 S4 138 B2 140 TCC8
KEWVEN-9	1.00 B	0.99 BB 0.01 B	123 B4
KEWVEN-10	0.51 S 0.49 BB	0.60 BB 0.38 S 0.02 B	88 S5 89 BB1 103 B2
KEWVEN-11	0.92 TCC 0.08 S	0.50 TCC 0.27 S 0.20 B 0.02 CC 0.01 BB	137 TCC4 139 S2 142 B4
KEWVEN-12	0.91 S 0.09 B	0.51 S 0.48 B 0.01 BB	B3 129 S4 131 B2 143 BB4
KEWVIR-1	1.00 S	0.80 S 0.15 B 0.03 BB 0.02 TCC	132 S6 139 B3 142 TCC5 143 BB2
KEWVIR-2	1.00 S	0.80 S 0.15 B 0.03 BB 0.02 TCC	132 S4 139 B2 142 TCC8
KEWVIR-3	0.99 BB	0.76 BB	225 BB3

	0.01 S	0.24 S	227 S3
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
KEWVIR-4	1.00 B3	0.80 S 0.15 B 0.03 BB 0.02 TCC	132 S6 139 B3 142 TCC5 143 BB4
KEWVOX-1	1.00 S	0.79 S 0.12 B 0.04 BC 0.01 TCC	132 S8 138 BC10 139 B3 142 TCC5
KEWVOX-2	1.00 S	0.79 S 0.12 B 0.04 BC 0.01 TCC	132 S2 138 BC16 139 B3
KEWVOX-3	0.99 BB 0.01 S	0.77 BB 0.23 S	219 BB1 221 S1
KEWVOX-4	1.00 S	0.79 S 0.12 B 0.04 BB 0.01 TCC	132 S8 139 B1 143 BB4
KEWVOX-1	1.00 S		
KEWVOX-2	1.00 S		
KEWVOX-3	1.00 BB		
KEWVOX-4	1.00 S		
KUBMAW	0.02 S 0.98 B		
KUBMEA	1.00 CC		
KUDJAV	1.00 BC		
KUJFAX	1.00 TBC		
KUNZIC	1.00 TC	1.00 TC	109 TC8
KUNZIC10	1.00 CC	0.98 CC 0.02 TCC	91 CC2 109 TCC2
LETLIF	1.00 CC	0.98 CC 0.002 TCC	91 CC2 109 TCC2
MEKDUC	1.00 BB		
MIKRAA-1	1.00 BB		
MIKRAA-2	1.00 CC		
MOQWIZ-1	1.00 TBC		
MOQWIZ-2	1.00 BB		
MRIMCU -1	0.98 BB 0.01 S 0.01 CC	0.65 BB 0.19 S 0.12 CC 0.04 TCC	155 BB4 158 S4 158 CC8

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
MRIMCU -2	0.99 TBC 0.01 TC	0.64 TBC 0.25 TC 0.10 BC	125 TBC15 129 TC8 134 BC10
MRIMCU -3	0.91 CC 0.09 TCC	1.00 CC	102 CC8 112 TCC8
MRIMCU -4	1.00 TC	0.99 TC 0.01 C	66 TC8 93 C3
NAHXEZ -1	1.00 BC	1.00 BC	239 BC1
NAHXEZ -2	1.00 TC	0.99 TC 0.01 TBC	154 TC6 162 TBC1
NAHXEZ -3	1.00 S	0.82 S 0.16 BB 0.02 BC	260 S6 264 BB2 265 BC2
NAXWUF-1	1.00 S		
NAXWUF-2	1.00 S		
NILKAV	1.00 S		
NIRJED -1	0.70 BB 0.30 S	0.66 BB 0.33 S 0.01 BC	126 BB2 126 S2 134 BC12
NIRJED -2	0.99 TBC 0.01 BC	0.75 TBC 0.24 BC 0.01 TC	78 TBC14 93 BC1 100 TC4
NOKPUY -1	1.00 S	0.90 S 0.06 BB 0.04 B	116 S2 127 BB2 128 B4
NOKPUY -2	1.00 TCC	0.91 TCC 0.08CC	129 TCC1 136 CC8
NOKPUY -3	1.00 S	0.85 S 0.11 B 0.04 BB	126 S8 134 B1 137 BB4
NOKPUY -4	1.00 TCC	0.79 TCC 0.12 S 0.07 CC 0.02 C 0.01 BB	134 TCC4 139 S2 141 CC4
NOKQAF -1	1.00 S	0.89 S 0.07 BB 0.03 B	119 S2 129 BB2 132 B4
NOKQAF -2	1.00 TCC	0.87 TCC 0.12 CC 0.01 S	131 TCC1 137 CC8 144 S8
NOKQAF -3	1.00 S	0.81 S 0.15 B	127 S8 134 B1

		0.03 BB 0.02 TCC	139 BB4 147 TCC1
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
NOKQAF -4	1.00 S	0.81 S 0.10 B 0.04 BB 0.02 TCC	132 S2 140 B4 142 TCC4
NOQYOH	1.00 BC	0.80 BC 0.20 TBC	86 BC10 93 TBC6
NUMRAO	1.00 CC	0.99 CC 0.01 TCC	103 CC6 123 TCC6
OJOVAK	1.00 BC	1.00 BC	266 BC3
PAFCUU	1.00 TC	1.00 TC	119 TC4
PAGTAT	1.00 CC		
PAGTEX-1	1.00 TC		
PAGTEX-2	0.99 C 0.01 TC		
PAGTEX-3	1.00 BC		
PAGTEX-4	1.00 TCC		
PAGTEX-5	1.00 BC		
PAGTEX	1.00 BC		
PAGTOH	1.00 CC		
PAKLIW -1	1.00 BC	0.69 BC 0.27 S 0.02 BB	125 BC4 130 S8 139 BB4
PAKLIW -2	1.00 BC	0.93 BC 0.01 TCC 0.01 B	126 BC16 142 TCC4 144 B4
PAKLIW -3	0.60 TC 0.35 TBC 0.05 C	0.48 TC 0.26 C 0.25 TBC	134 TBC10 134 TC8 136 C6
PAKLIW -4	0.99 BC 0.01 TBC	0.75 BC 0.25 TBC	215 BC11 227 TBC16
PAKLIW -5	1.00 S	0.85 S 0.13 BB 0.01 B	121 S8 129 BB4 136 B1
PAKLIW -6	1.00 TCC	0.80 TCC 0.11 CC 0.05 BC	132 TCC4 138 CC4
PATKIE -1	1.00 TCC	0.79 TCC 0.10 S 0.07 B 0.03 CC	135 TCC5 141 S6 144 B3 144 CC4
PATKIE -2	0.99 TCC	0.63 TCC	138 TCC1

	0.01 S	0.18 S 0.17 B 0.02 CC	141 S8 143 B1 148 CC8
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
PATKIE -3	1.00 B	0.99 B 0.01 S	84 B3 102 S6
PATKIE -4	1.00 TC	0.98 TC 0.01 TBC 0.01 C	126 TC8 138 TBC10 139 C6
PATKIE -5	0.99 S 0.01 B	0.64 S 0.35 B 0.01 BB	124 S4 128 B2 138 BB4
PATKIE -6	0.98 S 0.02 B	0.54 S 0.36 B 0.09 TCC 0.01 BB	135 S2 138 B4 140 TCC4
PATKIE -7	0.87 S 0.13 B	0.51 B 0.49 S 0.01 BB	115 S6 117 B3 132 BB2
PATKIE -8	1.00 TCC	0.82 TCC 0.10 S 0.05 CC 0.03 C	137 TCC1 144 S8 146 CC8
PATKIE -9	0.97 BB 0.03 S	0.73 BB 0.27 S	225 BB3 226 S3
PATKIE -10	0.54 BB 0.46 S	0.60 BB 0.37 S 0.02 C	95 S7 96 BB3 106 S3
PATKIE -11	1.00 TCC	0.98 TCC 0.02 CC	128 TCC5 139 CC4
PATKIE -12	1.00 S	0.82 S 0.15 B 0.02 BB	115 S8 123 B1 129 BB4
PATKIE01 -1	1.00 TCC	0.83 TCC 0.08 S 0.07 C 0.03 CC	135 TCC5 142 S6 145 TCC4
PATKIE01 -2	1.00 B	0.98 B 0.02 S	93 B2 106 S5
PATKIE01 -3	0.90 S 0.10 B	0.50 S 0.48 B 0.01 BB	131 S4 134 B2 145 BB4

	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
PATKIE01 -4	1.00 S	0.62 S 0.24 B 0.08 BC	135 S6 139 BC12 140 B3
PATKIE 01-5	0.89 S 0.11 BB	0.46 S 0.45 BB 0.08 B	100 S1 103 BB1 109 B3
PATKIE 01-6	0.99 S 0.01 B	0.68 S 0.31 B 0.01 BB	123 S6 128 B3 137 BB2
PEMPED	0.07 BC 0.93 BB		
PESTOW -1	1.00 B	1.00 B	111 B1
PESTOW -2	1.00 B	1.00 B	103 B4
PESTOW -3	1.00 B	0.94 B 0.06 BC	120 B1 125 BC4
PEYLIP-1	1.00 BC		
PEYLIP-2	0.78 BB 0.22S		
PEYLIP-3	1.00 S		
PIBFIQ	0.02 BB 0.98 S		
PILZOA-1	1.00 B		
PILZOA-2	1.00 S		
PILZOA-3	1.00 S		
PONLEK-1	0.77 BC 0.23 S		
PONLEK-2	0.98 BB 0.02 S		
PONLEK-3	1.00 BC		
PONLEK-4	0.98 BB 0.02 S		
PONLIO	1.00 BB		
PYMTMO -1	1.00 BB	0.94 BB 0.06 S	272 BB3 276 S3
PYMTMO -2	1.00 CC	1.00 CC	193 CC8
QEKGOC	1.00 BB	0.85 BB 0.15 S	94 BB1 101 S1 101 S5
QISCOK	0.81 TCC 0.19 BC	0.68 TCC 0.31 BC 0.07 CC	167 TCC4 167 BC16 177 CC4
QIXBOP-1	1.00 S		
QIXBOP-2	1.00 S		

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
QIXBOP-3	1.00 BB		
QIXBOP-4	1.00 S		
QIXBUV-1	1.00 BC		
QIXBUV-2	0.56 BB 0.44 S		
QIXBUV-3	1.00 S		
QIXBUV-4	1.00 BC		
QIXBUV-5	1.00 B		
QIXBUV-6	1.00 TCC		
RALFUF	1.00 BC	1.00 BC	264 BC5
RAPVAF	1.00 BC	1.00 BC	209 BC14
RAPVAF01	---	---	---
RAPVAF02-1	0.99 BC 0.01 BB		
RAPVAF02-2	1.00 BC		
RAPVEJ	1.00 CC	0.99 CC 0.01 TCC	101 CC6 118 TCC6
RIGMAV	0.95 TBC 0.05 C		
RUQUJ	0.20 BC 0.80 TBC		
SANMOK	1.00 CC		
RIGMAV	0.95 TBC 0.05 C	0.47 TBC 0.42 C 0.09 BC	354 TBC15 355 C3 355 BC10
SESBAT	1.00 BB	0.92 BB 0.08 S	261 BB3 265 S3 265 S7
SEZKEN -1	0.83 BC 0.17 TBC	0.42 BC 0.40 TBC 0.17 C 0.01 TC	358 BC16 358 TBC4 360 C4
SEZKEN -2	1.00 CC	1.00 CC	184 CC8
SIWZIH	---	---	---
TAZYAV-1	1.00 TC		
TAZYAV-2	1.00 TC		
TEFJUK-1	1.00 TBC		
TEFJUK-2	1.00 BC		
TEFJUK-3	1.00 CC		
TEFJUK-4	1.00 TC		
TIMXOD	0.96 BC 0.04 CC		
TOZVAF -1	1.00 BB	0.84 BB	93 BB3

		0.16 S	99 S2 99 S7
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
TOZVAF -2	1.00 BB	0.84 BB 0.16 S	80 BB1 88 S1 88 S5
TUHLAK-1	1.00 B		
TUHLAK-2	1.00 BB		
TUHLEO-1	1.00 BC		
TUHLEO-2	1.00 BB		
TUHLEO-3	1.00 BC		
TUHLEO-4	0.98 BB 0.02 S		
TUHLOY-1	0.98 BB 0.02 S		
TUHLOY-2	1.00 BC		
TUHLOY-3	1.00 BC		
TUHLOY-4	1.00 BC		
TUHLUE-1	0.98 BB 0.02 S		
TUHLUE-2	1.00 BC		
TUHLUE-3	1.00 BC		
TUHLUE-4	1.00 BC		
TUHMAL-1	1.00 BC		
TUHMAL-2	0.80 BB 0.20 S		
TUHMAL-3	1.00 BC		
TUKVAW	1.00 BC	0.93 BC 0.07 TBC	120 BC8 128 TBC5
VEKFEW -1	0.96 S 0.04 BC	0.72 S 0.19 BC 0.06 BB 0.04 B	125 S2 127 BC16 135BB2
VEKFEW -2	0.99 BB 0.01 S	0.78 BB 0.22 S	218 BB1 221 S1
VEKFEW -3	1.00 BC	0.84 BC 0.09 TCC 0.05 S	129 BC4 138 TCC1 139 S8
VEKFEW -4	0.99 BB 0.01 S	0.77 BB 0.23 S	216 BB1 219 S1 219 S5
VOMBIJ	1.00 TBC		
VUYZEU	1.00 CC	1.00 CC	197 CC6
WAJHUL-1	0.01S 0.99 B		

WAJHUL-2	1.00 BC		
	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
REFCODE	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
WAJHUL-3	1.00 TC		
WETRIW -1	1.00 BB	0.95 BB 0.05 S	185 BB4 191 S4 191 S8
WETRIW -2	1.00 BB	0.95 BB 0.05 S	168 BB2 174 S2
WEXVIE -1	1.00 BB	0.94 BB 0.06 S	261 BB3 265 S3 265 S7
WEXVIE -2	1.00 BB	0.94 BB 0.06 S	264 BB3 265 S3 265 S7
WIVTIE	0.90 TBC 0.06 BC 0.04 C	0.47 TBC 0.36 C 0.16 BC	354 TBC2 354 BC14 355 C2
XUDKOX	0.97 S 0.03 B		
YERZEA	0.76 S 0.21 TCC 0.15 B 0.01 BC	0.38 S 0.28 TCC 0.24 B 0.08 BC	136 S2 137 TCC4 139 BC16
YERZOK -1	1.00 S	0.77 S 0.13 BB 0.06 TCC 0.02 CC 0.02 C	129 S4 137 BB4 137 TCC8
YERZOK -2	0.99 S 0.01 TCC	0.53 S 0.20 BB 0.15 TCC 0.12 CC	131 S8 135 TCC1 136 CC8 136 BB4
YOFYIB -1	1.00 TC	1.00 TC	109 TC4
YOFYIB -2	1.00 CC	0.93 CC 0.04 TCC 0.03 BB 0.01 S	130 CC4 140 TCC5 142 BB2
YOFYIB -3	0.80 S 0.20 BB	0.52 BB 0.45 S 0.03 CC 0.01 TCC	133 S8 135 BB4 141 CC8 145 TCC1
YOLVEB-1	1.00 S		
YOLVEB-2	1.00 BB		
YOLVEB-3	0.47 CC 0.53 TCC		
YOLVEB-4	1.00 BB		

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
YUCDUV	1.00 BC	1.00 BC	307 BC14
YUMCIS	1.00 BB	0.94 BB 0.06 S	276 BB1 280 S1
ZIFLAB	0.53 TC 0.47 C	0.51 TC 0.49 C	125 TC6 125 C1
ZIFLAB01	1.00 TC	0.97 TC 0.03 C	89 TC6 104 C4
ZONWEE -1	0.98 BB 0.02 BC	0.77 BB 0.13 S 0.10 BC	163 BB4 164 BC10 166 S4
ZONWEE -2	1.00 BC	1.00 BC	229 BC1
ZONWEE -3	1.00 CC	0.96 CC 0.04 TCC	93 CC6 106 TCC6
ZONWEE -4	1.00 S	0.95 S 0.05 BB	152 S6 161 BB2
ZONWEE01 -1	1.00 TBC	0.86 TBC 0.12 TC 0.01 BC 0.01 B	128 TBC12 136 TC2 141 BC15
ZONWEE01 -2	0.71 BB 0.29 S	0.84 BB 0.16 S	265 BB3 262 S7
ZUDYIG	1.00 BB	0.90 BB 0.10 S	79 BB3 90 S3 90 S7
ZUDYOM	1.00 BB	0.90 BB 0.10 S	80 BB1 89 S5
SUJMUG	0.98 BC 0.02 BB		
SUJNAN	1.00 B		
SUJNER	1.00 B		
SUJNIV	0.85 TBC 0.15 TC		
BUYDAB	0.04 CC 0.96 TCC		
KUYMIB	1.00 TBC		
NUSRUP-1	1.00 S		
NUSRUP-2	1.00 TBC		
NUSRUP-3	1.00 BC		
NUVYEJ	1.00 CC		
TUXZOC	1.00 S		
ELEXAV	1.00 B		
ELOTEF-1	0.91 S 0.09 B		

REFCODE	Dpto. Matemática Aplicada		Área Química Inorgánica
	$\sigma = 10^\circ$	$\sigma = 20^\circ$	
ELOTEF-2	0.99 BB 0.01 S		
ELOTEF-3	1.00 BC		
ELOTEF-4	1.00 BB		
FABVUB	1.00 CC		
EMIZIK	1.00 S		
IQATUQ	1.00 TC		
IQAVAY	1.00 TC		
UNAVAH	1.00 TC		
ISUMUF-1	1.00 S		
ISUMUF-2	1.00 BC		
ISUMUF-3	1.00 CC		
ISUNAM-4	0.96 BB 0.04 S		
ISUNAM-5	1.00 S		
340			

Apéndice 3:

n	ref.	nº frag.	metal	TIPO ENLACE	FUNCION	ENLACE M-M	Conformaciones más probables de los fragmentos						
							1	2	3	4	5	6	
							7	8	9	10	11	12	
1	AFUROI	2	Re-Re	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	TRIPLE	0.74 TCC	0.74 CC					
2	AFUTUQ	1	Pd-Pt	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	1.00 BC						
3	AKANEF	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
4	ASIPAT	1	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	AMINOBENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BB						
5	BAKHOL	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 B						
6	BAKHUR	2	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TC	1.00 B					
7	BAZCIO	0	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO							
8	CATNIU	0	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO							
9	CATNIU10	1	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 B						
10	CIPKAN	2	Mo-Mo	OTROS	FIENILFOSFINO	TRIPLE	1.00 BC	1.00 CC					
11	CUPGUQ	1	Pt-Pt	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 S						
12	CUPHIF	1	Pt-Pt	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 S						
13	CUPHOL	1	Pt-Pt	OTROS	BENZOXAZOL	SIMPLE	1.00 S						
14	CUPHUR	1	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S						
15	CUSHUT	0	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE							
16	DEBKIE	1	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BB						
17	DEBQUX	1	Pd-Pd	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 BC						
18	DEBTOU	3	Pd-Pd	OTROS	TETRAZOL 5 TIOLATO	NO	0.78 S	0.97 S	1.00 BC				
19	DETIQIC	2	Fe-Ag	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 TCC	0.55 BB					
20	DETQOI	1	Fe-Ag	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 S						
21	DIFROA	1	Cu-Cu	OTROS	TIOSACCHARINATO	NO	1.00 TC						
22	DUFFIU	1	Cu-W	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
23	EHAPUY	1	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S						
24	EJAKOP	2	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S	1.00TCC					
25	EJAKUV	2	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S	0.93 S					
26	FANFUV	2	Cu-Cu	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	1.00 BB	1.00 CC					
27	FAWJIW	3	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.76 S	0.68 S	0.86 S				
28	FAWJOC	2	Pt-Pt	OTROS	2-TIOLATO	SIMPLE	0.72 S	1.00 S					
29	FAWJUI	2	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 S					
30	FEGFEC	1	Cd-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 TBC						
31	FEJZEZ	6	Co-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.67 S	1.00 B	1.00 S	0.95 TCC	0.98 S	0.97 S	
32	FELBON	0	Pd-Pd	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE							
33	FELBON10	1	Pd-Pd	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.82 BB						
34	FETCAI	6	Rh-Rh	LACTAMATO	TIOLACTAMATO	DOBLE	1.00 BC	0.96 TCC	1.00 S	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	
35	FETCEM	4	Rh-Rh	LACTAMATO	TIOLACTAMATO	DOBLE	1.00 S	0.99 BB	1.00 S	1.00 S			
36	FIQQAY	1	Re-Re	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	DOBLE	1.00 TC						
37	FIQQEC	0	Re-Re	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	DOBLE							
38	FIQQIG	1	Re-Re	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	DOBLE	1.00 TC						
39	FIQQOM	1	Re-Re	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	DOBLE	1.00 CC						
40	FISHIZ	1	Ag-Ag	OTROS	PIRIDINA	NO	1.00 TC						
41	FOPJAV	2	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.94 S	0.98 S					
42	FOPJEZ	1	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.90 S						
43	FOWDIE	2	Pt-Pt	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	0.99BB	0.99 BB					
44	GALXAS	1	Ir-Ir	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	0.74 B						
45	GOBDUW	1	K-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 CC						
46	GOBFEI	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TC						
47	GOBFEI01	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TC						
48	GODLOB	1	Ag-Ag	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BB						
49	GOXGUV	4	Rh-Ti	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 BB	1.00 BC	1.00 BB	1.00 BC			
50	IFAFOL	2	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
51	IPAHEM	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 CC						
52	IXUFIQ	4	Pt-Cr	OTROS	MERCAPTOPIRIDINA	NO	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	1.00 S			
53	IXUFOW	4	Pt-Cr	LACTAMATO	LACTAMATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	1.00 S			
54	IXUGAJ	4	Pt-Cr	LACTAMATO	LACTAMATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	1.00 S			
55	IXUGEN	4	Pt-Cr	LACTAMATO	LACTAMATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	1.00 S			
56	JADYOC	0	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE							
57	JAMPAO	1	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 B	1.00 CC					
58	JAVPAX	1	Hg-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.99 BC						
59	JESKOH	0	Cu-Cu	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO							
60	JEYXER	0	K-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO							
61	JIRQOR	1	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BB						
62	JONHUP	0	Pb-Pb	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO							
63	JOSCOJ	6	Pt-Ca	OTROS	MERCAPTOBENZOOZAZOL	NO	0.59 S	1.00 S	0.96 S	0.87 S	0.98 S	1.00 TCC	
64	JUCVEI	1	Ag-Co	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TBC						
65	KALPAP	1	Ag-Ag	OTROS	COMPROBAR	NO	0.93 BC						
66	KAMROF	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.53 BC						
67	KAXZUE	1	Al-Al	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 BB						
68	KAZMEE	1	Ti-Ti	OTROS	COMPROBAR	NO	1.00 CC						
69	KEWVEN	12	Cr-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 TCC	1.00 S	0.84 S	1.00 TC	1.00 S	0.99 S	
70	KEWVIR	4	Cr-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	0.99 S	0.92 S	1.00 B	0.51 S	0.92 TC	0.91 S	
71	KEWVOX	4	V-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 S	1.00 S	0.99 BB	1.00 S			
72	KUBMAW	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.98 B						
73	KUBMEA	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 CC						
74	KUDJAV	1	Pt-Rh	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	1.00 TBC						
75	KUJFAX	1	Mn-Mn	OTROS	2 TIOLATO	NO	1.00 TBC						
76	KUNZIC	1	Na-V	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 TC						
77	KUNZIC10	1	Na-V	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 CC						
78	LETLIF	1	Cd-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 CC						
79	MEKDUC	1	Cd-Cd	OTROS	OXADIAZOLATO	NO	1.00 BB						
80	MIKRAA	2	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BB	1.00 CC					
81	MOQWIZ	2	Mn-Mn	IMIDAZOLATO	1 MERCAPTO-IMIDAZOL	NO	1.00 TBC	1.00 BB					
82	MRIMCU	4	Cu-Cu	IMIDAZOLATO	2 MERCAPTO-IMIDAZOL	NO	0.98 BB	0.99 TBC	0.91 CC	1.00 TC			
83	NAHXEZ	3	K-Bi	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC	1.00 TC	1.00 S				
84	NAXWOZ	0	Pd-Pd	OTROS	COMPROBAR TIOTIMIN	SIMPLE							
85	NAXWUF	2	Pt-Pt	OTROS	COMPROBAR TIOTIMIN	SIMPLE	1.00 S	1.00 S					
86	NILKAV	1	Ag-Ni	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 S						

n ref.	nº frag.	metal	TIPO ENLACE	FUNCION	ENLACE M-M	Conformaciones más probables de los fragmentos							
						1 7	2 8	3 9	4 10	5 11	6 12		
87	NIRJED	2	Cu-Cu	OTROS	TETRAZOL 5 TIOLATO	NO	0.70 BB	0.99 TBC					
88	NOKPUY	4	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 TCC	1.00 S	1.00 TCC			
89	NOKQAF	4	Pt-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 S	1.00 TCC	1.00 S	1.00 S			
90	NOQYOH	1	Eu-Sn	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 CC						
91	NUMRAO	1	Cd-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 CC						
92	OJOVAK	1	Pd-Pt	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	1.00 BC						
93	PAFCUU	1	Rh-Pt	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 TC						
94	PAGTAT	1	Ag-Fe	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 CC						
95	PAGTEX	6	Ag-Fe	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 TC	0.99 C	1.00 BC	1.00 TCC	1.00 BC	1.00 BC	
96	PAGTOH	1	Ag-Fe	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	1.00 CC						
97	PAKLIW	6	Rh-Rh	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 BC	1.00 BC	0.60 TC	0.99 BC	1.00 S	1.00 TCC	
98	PATKIE	12	Ni-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 TCC	0.87 S	1.00 TCC	0.97 BB	0.54 BB	1.00 TC	1.00 S
99	PATKIE01	6	Ni-Pt	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 TCC	1.00 B	0.90 S	1.00 S	0.89 S	0.99 S	
100	PEMPED	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.93 BB						
101	PESTOW	3	Co-Co	OTROS	MERCAPTOBENZOOZAZOL	NO	1.00 B	1.00 B	1.00 B				
102	PEYLIP	3	K-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC	0.78 BB	1.00 S				
103	PBIFIQ	1	Cd-Cd	OTROS	OXADIAZOLATO	NO	0.98 S						
104	PILZOA	3	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	SIMPLE	1.00 B	1.00 S	1.00 S				
105	PONLEK	4	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	NO	0.77 BC	0.98 BB	1.00 BC	0.98 BB			
106	PONLIO	1	Pd-Pd	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	NO	1.00 BB						
107	PYMTMO	2	Mo-Mo	PIRIMIDINA 2 TIOLATO	PIRIMIDINA 2 TIOLATO	TRIPLE	1.00 BB	1.00 CC					
108	QEKFES	0	Ag-Ag	OTROS	TETRAZOL 5 TIOLATO	SIMPLE							
109	QEKGOC	1	Fe-Fe	IMIDAZOLATO	TIOIMIDAZOLATO	NO	1.00 BB						
110	QISCOK	1	Ru-Ru	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	SIMPLE	0.81 TCC						
111	QIXBOP	4	Ni-Ni	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	NO	1.00 S	1.00 S	1.00 BB	1.00 S			
112	QIXBUV	6	Ni-Ni	MERCAPTOBENZOTIAZOLATO	BENZOTIAZOLATO	NO	1.00 BC	0.56 BB	1.00 S	1.00 BC	1.00 B	1.00 TCC	
113	RALFUF	1	Cu-Ba	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
114	RAPVAF	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
115	RAPVAF01	0	Cd-Cd			NO							
116	RAPVAF02	2	K-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	0.99 BC	1.00 BC					
117	RAPVEJ	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 CC						
118	RIGMAV	1	Pt-Ru	OXAMIDATO	DIAMIATO	NO	0.95 TBC						
119	RUQUJ	1	Re-Re	IMIDAZOLATO	METILIMIDAZOLATO	NO	0.80 TBC						
120	SANMOK	1	Pd-Pd	IMIDAZOLATO	MERCAPTOBENZIMIDAZOLATO	SIMPLE	1.00 CC						
121	SESBAT	1	Ag-Ag	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BB						
122	SEZKEN	2	Mo-Mo	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	DOBLE	0.83 BC	1.00 CC					
123	SIWZIH	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 B						
124	TAZYAV	2	Ag-Fe	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TC	1.00 TC					
125	TEFJUK	4	Cu-Cu	IMIDAZOLATO	TIOIMIDAZOLATO	NO	1.00 TBC	1.00 BC	1.00 CC	1.00 TC			
126	TIMXOD	1	Pb-Pb	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.96 BC						
127	TOZVAF	2	Cu-Li	OTROS	BENZOXAZOL	NO	1.00 BB	1.00 BB					
128	TUHLAK	2	Ni-Ni	OTROS	BUTILIMIDAZOLATO 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 B	1.00 BB					
129	TUHLAO	4	Ni-Ni	OTROS	BUTILIMIDAZOLATO 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 BC	1.00 BB	1.00 BC	0.98 BB	0.02 S		
130	TUHLLOY	4	Ni-Ni	OTROS	BUTILIMIDAZOLATO 2 TIOLATO	SIMPLE	0.98 BB	0.100 BC	1.00 BC	1.00 BC			
131	TUHLUE	4	Pd-Pd	OTROS	BUTILIMIDAZOLATO 2 TIOLATO	SIMPLE	0.98 BB	0.100 BC	1.00 BC	1.00 BC			
132	TUHMAL	3	Pd-Pd	OTROS	BUTILIMIDAZOLATO 2 TIOLATO	SIMPLE	1.00 BC	0.80 BB	1.00 BC				
133	TUKVAW	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BC						
134	VEKFEW	4	Ni-Ni	OTROS	THIAZOLINA 2 TIONATO	SIMPLE	0.96 S	0.99 BB	1.00 BC	0.99 BB			
135	VOMBU	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TBC						
136	VUYZEU	1	K-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 CC						
137	WAJHUL	3	Cd-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	0.99 B	1.00 BC	1.00 TC				
138	WETRIV	2	K-Bi	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BB	1.00 BB					
139	WEXVIE	2	Mo-Mo	OTROS	NAPHTHYRIDIN 2 TIONATO	TRIPLE	1.00 BB	1.00 BB					
140	WIVTIE	1	Pt-Pd	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	0.90 TBC						
141	XUDKOX	1	Cu-Cu	OTROS	BENZISOTIAZOL 3 TIOLATO	SIMPLE	0.97 S						
142	YERZEA	1	Pd-Pd	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	NO	0.76 S						
143	YERZOK	2	Pd-Pd	IMIDAZOLATO	METILIMIDAZOLATO	NO	1.00 S	1.00 S					
144	YOFYIB	3	Re-Re	PIRIDINA 2 TIOLATO	PIRIDINA 2 TIOLATO	TRIPLE	1.00 TC	1.00 CC	0.80 S				
145	YOLVEB	4	Pd-Sn	OTROS	METIMAZOL	SIMPLE	1.00 S	1.00 BB	0.53 TCC	1.00 BB			
146	YUCDUV	1	Cu-Ni	OXAMIDATO	DITIOOXAMIDATO	NO	1.00 BC						
147	YUMCIS	1	Hg-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 BB						
148	ZIFLAB	1	Cs-Cd	ISOTIOCIANATO	ISOTIOCIANATO	NO	0.53 TC						
149	ZIFLAB01	1	Cs-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TC						
150	ZONWEE	4	Cd-Ag	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.98 BB	1.00 BC	1.00 CC	1.00 S			
151	ZONWEE01	2	Cd-Ag	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TBC	0.71 BB					
152	ZUDYIG	1	Gd-Gd	OTROS	DIETILAMINOTIACARBONIL	NO	1.00 BB						
153	ZUDYOM	1	Sm-Sm	OTROS	DIETILAMINOTIACARBONIL	NO	1.00 BB						
154	SUJMUG	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.98 BC						
155	SUJNAN	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 B						
156	SUJNER	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 B						
157	SUJNIV	1	Cd-Cd	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.85 TBC						
158	BUYDAB	1	Cu-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.96 TCC						
159	KUYMIB	1	Cd-Ag	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 TBC						
160	NUSRUP	3	Hg-Na	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 S	1.00 TBC	1.00 BC				
161	NUVYEJ	1	Cu-Cu	PIRIMIDINA 2 TIOLATO	PIRIMIDINA 2 TIOLATO	NO	1.00 CC						
162	TUXZOC	1	Cd-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 S						
163	TUYZOD	0	Ag-Ag	OTROS	BENZOISOTIAZOL 3 TIONATO	NO							
164	ELEXAV	1	Cu-Hg	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 B						
165	ELOTEF	4	In-K	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.91 S	0.99 BB	1.00 BC	1.00 BB			
166	FABVUB	1	Pt-Pt	OTROS	TETRAZOL 5 TIOLATO	SIMPLE	1.00 CC						
167	EMIZIK	1	Cd-Cd	OTROS	TRIAZOL 3 TIOLATO	NO	1.00 S						
168	IGATUQ	1	Pd-Sn	IMIDAZOLATO	METILIMIDAZOLATO	SIMPLE	1.00 TC						
169	IQAVAY	1	Pd-Sn	IMIDAZOLATO	METILIMIDAZOLATO	SIMPLE	1.00 TC						
170	UNAVAH	1	Cu-Cu	OTROS	TRIAZOL 3 TIOLATO	NO	1.00 TC						
171	ISUMUF	3	Ag-Pr	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	1.00 S	1.00 BC	1.00 CC				
172	ISUNAM	2	Ag-Pr	TIOCIANATO	TIOCIANATO	NO	0.96 BB	1.00 S					