

II.- METODOLOGÍA

II.1.- MEDIOS A UTILIZAR

II.1.1.- Base de datos CSD

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

La versión 5.24 de noviembre de 2002 contiene información sobre 272.066 compuestos y con la actualización de febrero de 2003 hay que añadir 9.870 compuestos más.

La información se organiza en tres categorías:

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

Los principales programas que permiten analizar esa información son:

- *ConQuest 1.6*: 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*: visualiza las estructuras en 3D.

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

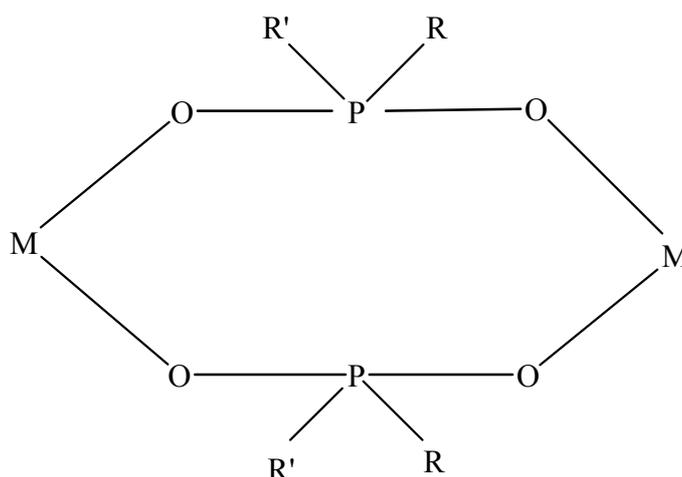
A cada entrada se le asigna un código o clave propio, *refcode*, compuesto de dos partes:

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

II.1.1.1.- Programa *ConQuest*

Seguidamente vamos a describir brevemente el empleo del programa *ConQuest 1.6* para formular un algoritmo de búsqueda que nos permita hallar los compuestos metálicos dinucleares con doble puente O–P–O, como el del esquema de la Figura 27:



Puente de fosfinato

Figura 27

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: P y O.
- 3º) Unión entre ellos hasta formar el esquema. En la pantalla del ordenador (Figura 28) aparecerá así:

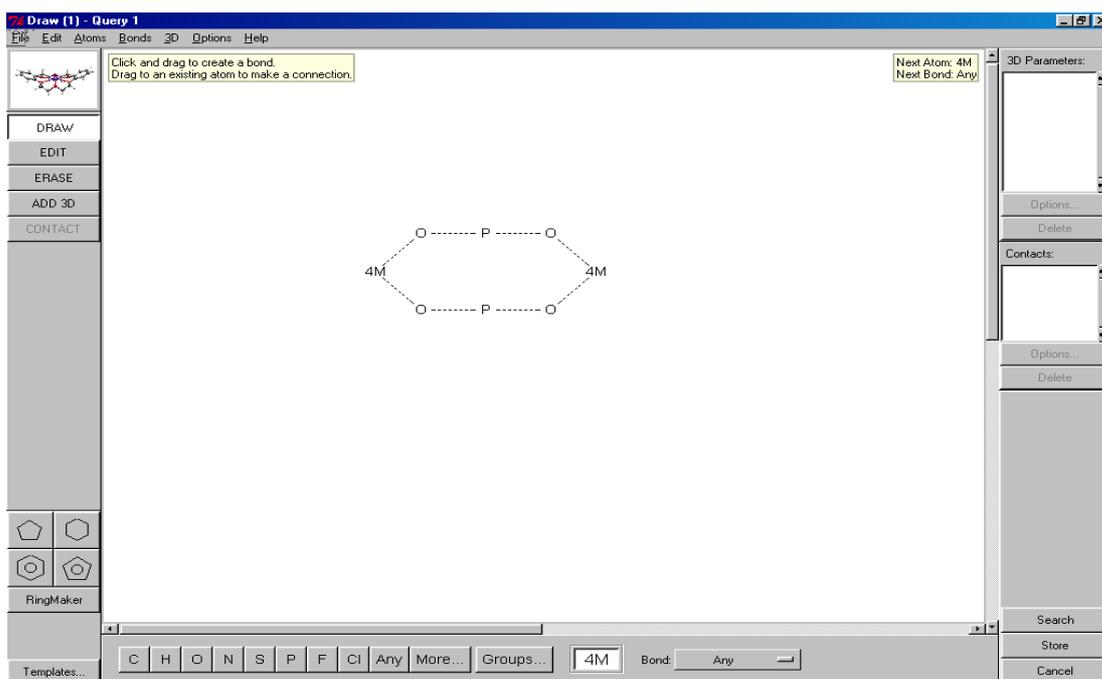


Figura 28

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 29.

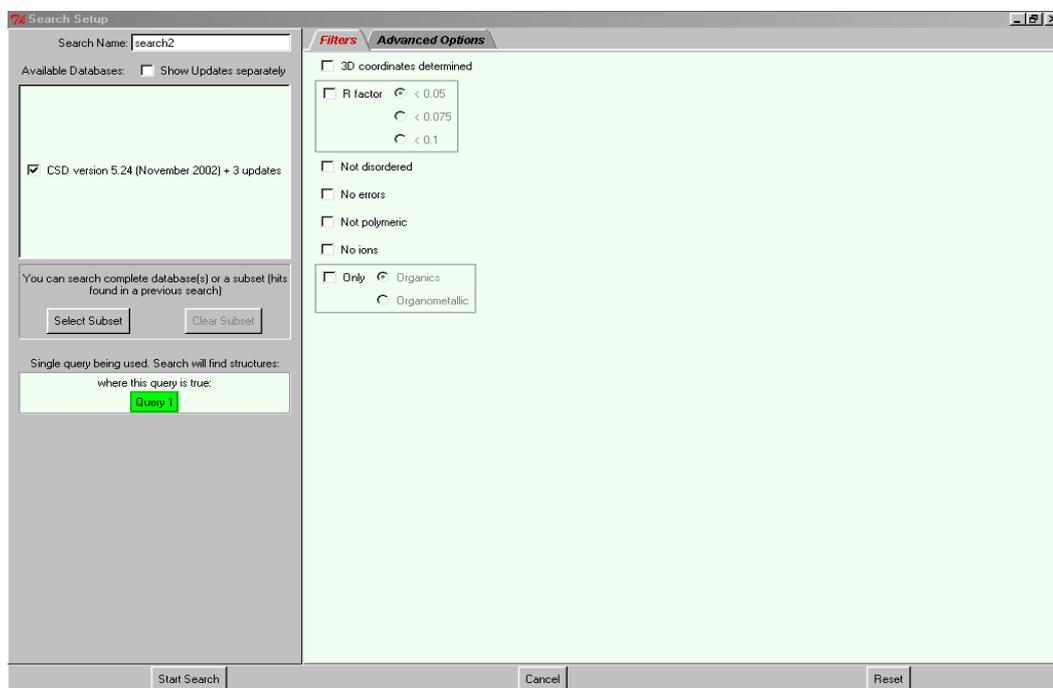


Figura 29

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 30:

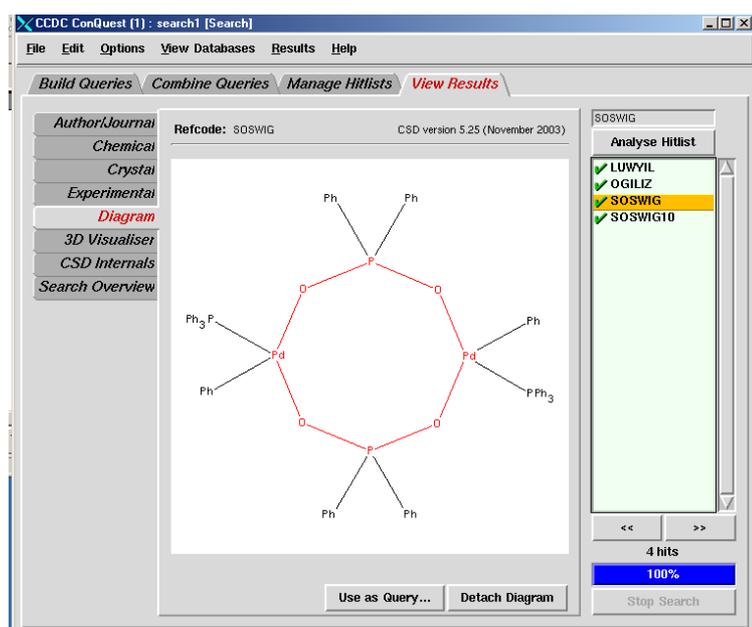


Figura 30

En el lado derecho de la pantalla aparecen los datos (*refcode*) como una vista secuencial ordenada alfabéticamente, recogiendo a su pie el número total de estructuras seleccionadas (138 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 31 se observa la pantalla principal:

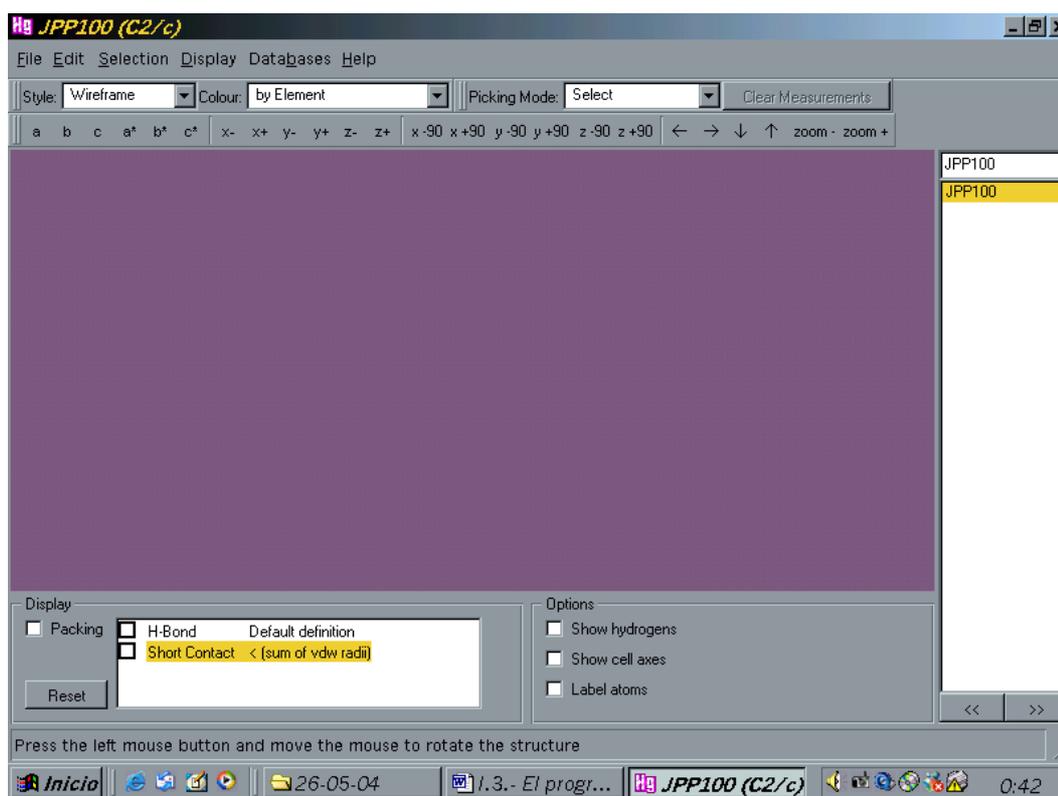


Figura 31.- Pantalla principal del programa

Entre las operaciones que se pueden realizar destacan las siguientes (Figuras 32 a 36):

- 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.

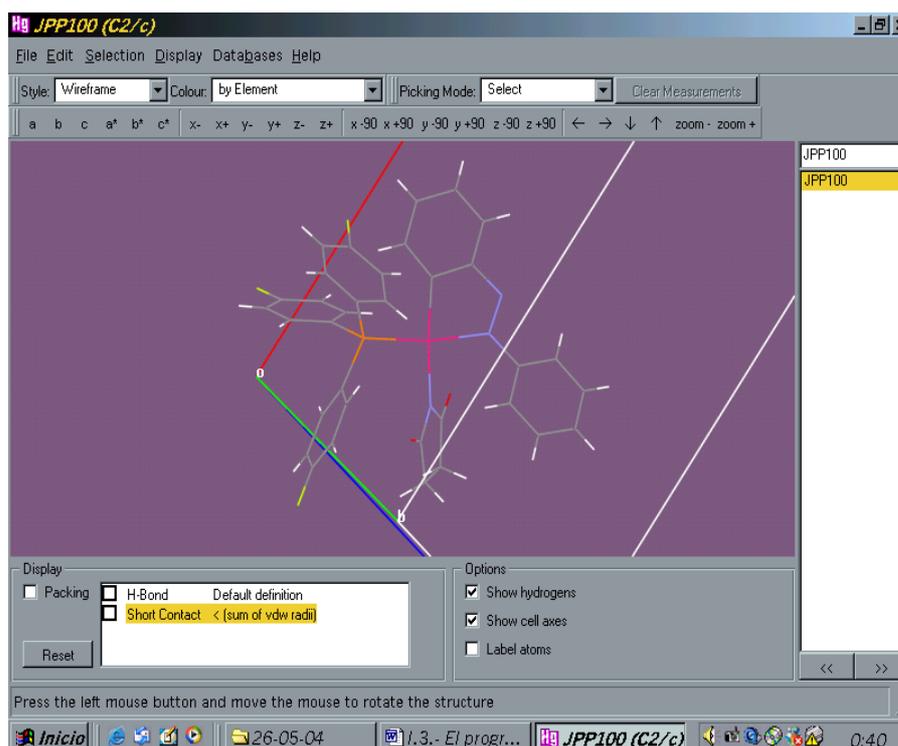


Figura 32

- 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.

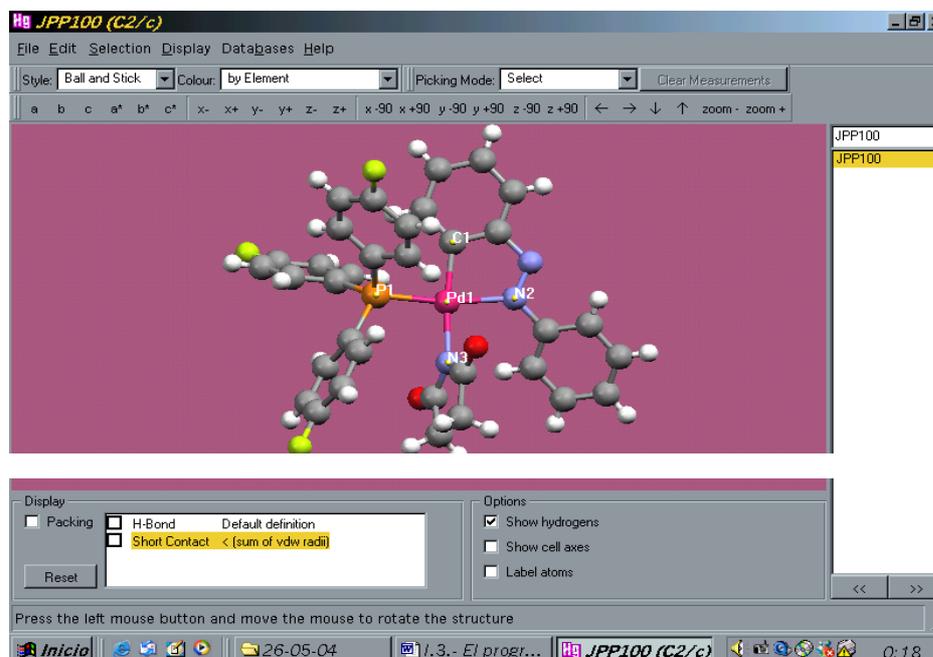


Figura 33

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

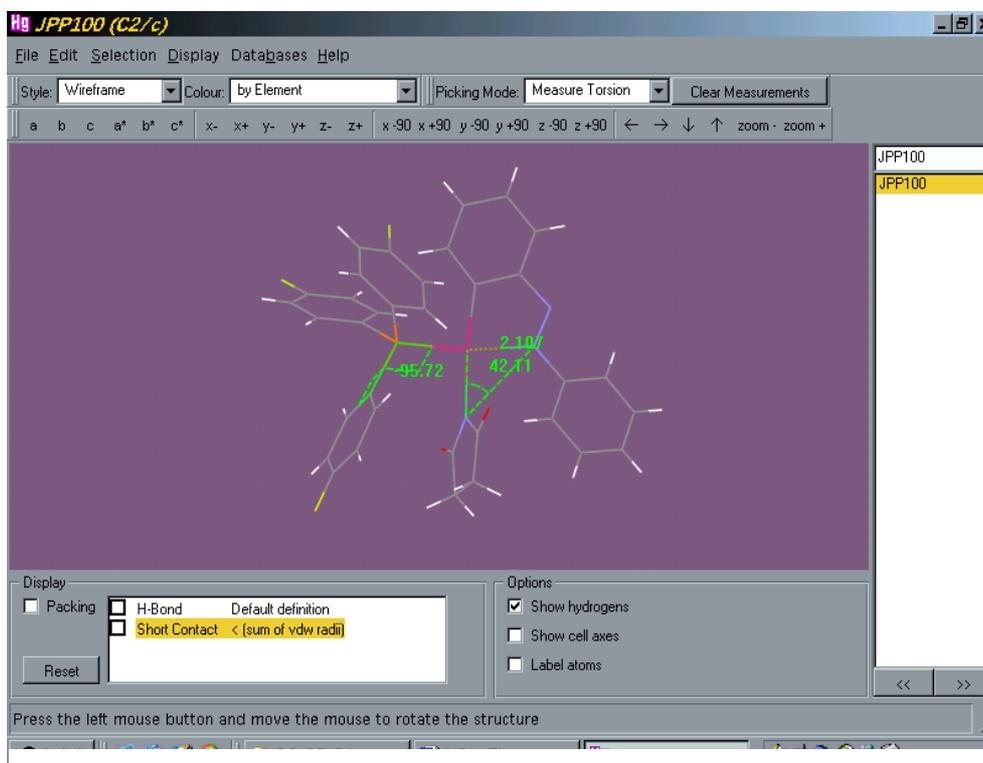


Figura 34

- 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.

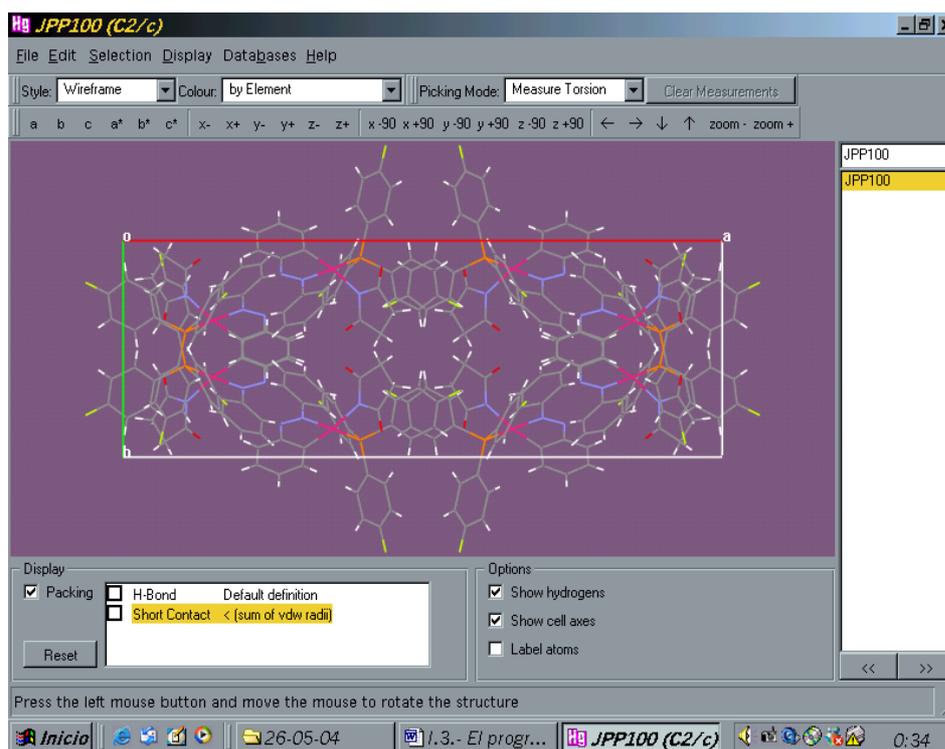


Figura 35

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

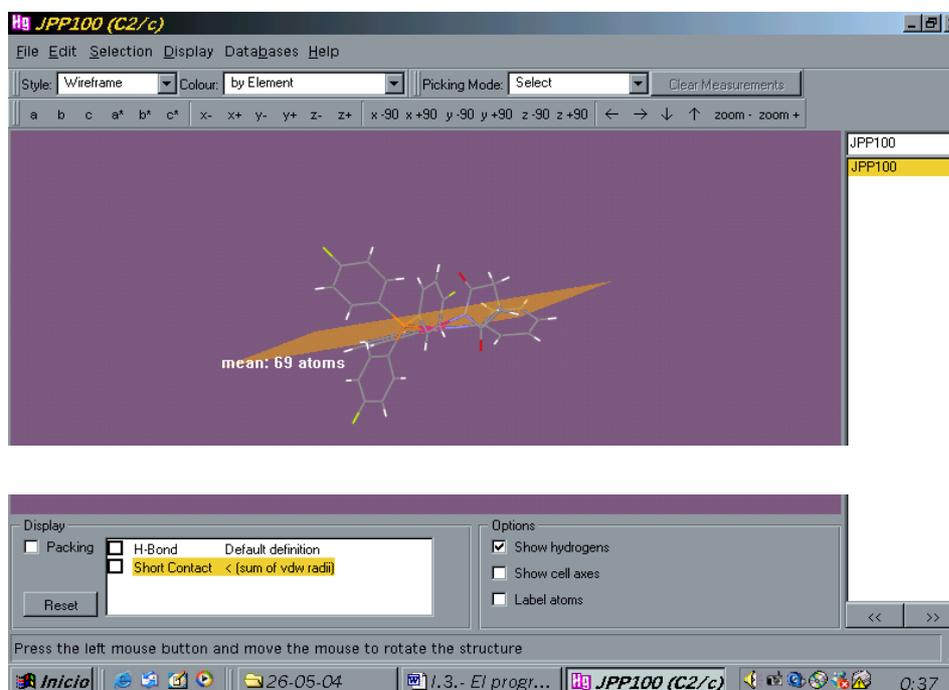


Figura 36

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 trabajo⁴⁵ 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.

II.1.2.- Programas específicos

II.1.2.1.- Implementación en Excel de un algoritmo estadístico de clasificación de conformaciones de n miembros

El profesor Mathieu Kessler, del Área de Estadística e Investigación Operativa del Departamento de Matemática Aplicada y Estadística de la Universidad Politécnica de Cartagena ha diseñado, a petición del Área de Química Inorgánica, un programa de *Excel* para realizar el análisis estadístico de una serie de datos experimentales (los ángulos de torsión de las configuraciones) y comprobar, a partir de este análisis, a qué configuración pertenecen de entre las teóricamente posibles.

El programa se ha desarrollado de una manera flexible y eficiente para que nosotros, los usuarios, podamos realizar pruebas no sólo para las 10 configuraciones de los anillos de 8 miembros, sino para cualquier otro número de configuraciones y átomos. El límite fijado es de 15 átomos y 30 configuraciones, lo que, de momento, satisface las necesidades del Área. El programa dispone, por defecto, de 8 átomos y 10 configuraciones.

Los datos –los 8 ángulos de torsión– deben disponerse en filas, independientemente de la posición de la columna de inicio y se debe dejar siempre en blanco la primera fila ya que ésta hará funciones intermedias a la hora de crear gráficas a partir de la macro correspondiente.

Una vez introducidos los datos se procede a ejecutar la macro estadística, que se encarga de desarrollar la función de probabilidad estadística denominada

$$h = \frac{g(y_1, y_2, \dots, y_{na}, c)}{\sum_{p=1}^{nc} g(y_1, y_2, \dots, y_{na}, p)}$$

donde na es el número de átomos predeterminado, c es la configuración particular para cada caso y p es el peso de cada una de las configuraciones desde 1 hasta el número total de configuraciones, nc .

El significado de la función g no se considera necesario para el correcto desarrollo del programa estadístico por lo que se omite su definición.

La ejecución de la macro se realiza mediante la secuencia de comandos Herramientas → Macro → Macros → *Función_H*, ubicándose siempre en la primera celda de cada serie. La macro se puede ejecutar de forma más simple y automatizada presionando simultáneamente Ctrl+Mayús+H y retornando siempre a la primera celda de la serie siguiente. De esta manera, la última columna de creación de datos indica, mediante un número, cuál es la configuración a la que pertenece el mayor valor de la función h creada nc veces. En nuestro estudio ese número variará desde 1 para la configuración *crown* (CR) hasta 10 para la *twist boat chair* (TBC).

En el programa se añade un archivo con el formato específico para 8 átomos (en negro) y 10 configuraciones (en rojo), más la celda de la configuración más probable (en verde), además de la primera fila coloreada de amarillo como recordatorio de que debemos dejarla siempre libre.

Como ejemplo explicatorio utilizamos la estructura de *refcode* SOSWIG. Previamente se han introducido en *Excel* los ángulos de torsión (ver Apéndice 1), utilizando comas como separador entre la parte entera y la decimal:

41,825 -116,9 93,82 -9,813 -41,825 116,985 -93,82 9,813

Ahora nos colocamos sobre la primera celda –en este caso la de valor 41.825– y pulsamos Ctrl+Mayús+H. El resultado es:

7,713E-234 1,021E-148 1,059E-149 9,259E-148 0,00536774
0,99463226 1,45E-230 8,454E-235 1,4517E-60 5,6333E-21

Esto significa que la conformación más probable es la número 6, la *twist chair*, con una probabilidad de 0.9946. El siguiente valor más probable es 0.00536774, prácticamente despreciable, correspondiente a la estructura 5, *chair*. Los restantes resultados son ínfimos.

Para poder valorar la potencia discriminadora del algoritmo vamos a repetir el proceso para una configuración en la que la asignación no es tan contundente. Para ello

utilizamos los datos de la estructura cuyo *refcode* es TAVYUK. Omitimos los valores de los ángulos de torsión y exponemos los resultados de la aplicación de la macro:

1,4479E-95 1,9163E-10 1,9889E-11 1,7381E-09 0,66322465
0,00313292 2,7215E-92 1,5871E-96 5,8735E-07 0,33364184

Esto significa que la configuración más probable es la **5**, *chair*, pero su valor es sensiblemente inferior a 1. Por tanto, las configuraciones más probables son, por este orden, la **5** (ya señalada), la **10** (*twist boat chair*) y la **6** (*twist chair*). En este ejemplo los valores no despreciables serían:

0.66322465 (estructura **5**), 0.33364184 (**10**) y 0.00313292 (**6**)

Los restantes valores son despreciables y prueba de ello es que la suma de los anteriores no despreciables es 1.00000000.

Este resultado, al igual que el de la estructura anterior, concuerda con el de otro algoritmo, desarrollado en el Área de Química Inorgánica, que vamos a explicar a continuación.

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 78 combinaciones de los valores teóricos de las 10 conformaciones definidas para anillos de ocho miembros (ver Tabla 5).

Tabla 5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Crown</i>	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
<i>Boat boat</i>	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
<i>Sofa</i>	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

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Boat</i>	-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
<i>Chair</i>	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
<i>Twist chair</i>	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
<i>Twist chair chair</i>	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
<i>Chair chair</i>	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
<i>Boat chair</i>	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
<i>Twist boat chair</i>	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

Para ello, utilizando el programa *Excel*, se define una función f , que aplicaremos 78 veces a cada uno de los 78 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

$$f(78) = [((\$Bn-\$B\$78)^2+(\$Cn-\$C\$78)^2+(\$Dn-\$D\$78)^2+(\$En-\$E\$78)^2+(\$Fn-\$F\$78)^2+(\$Gn-\$G\$78)^2+(\$Hn-\$H\$78)^2+(\$In-\$I\$78)^2)]^{0.5}$$

Sea por ejemplo, la estructura de *refcode* SOSWIG cuyos 8 ángulos de torsión son **41.825, -116.9, 93.82, -9.813, -41.825, 116.985, -93.82, 9.813**

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

$$f(1) = [(87.5 - 41.825)^2 + (-87.5 - (-116.9))^2 + (87.5 - 93.82)^2 + (-87.5 - (-9.813))^2 + (87.5 - (-41.825))^2 + (-87.5 - (116.985))^2 + (87.5 - (-93.82))^2 + (-87.5 - 9.813)^2]^{0.5}$$

cuyo valor es 332.

Al aplicar $f(78)$ estamos utilizando la última serie de valores, definida como TBC16:

$$f(78) = [(93.2 - 41.825)^2 + (-88.0 - (-116.9))^2 + (93.2 - 93.82)^2 + (-51.9 - (-9.813))^2 + (-44.8 - (-41.825))^2 + (115.6 - 116.985)^2 + (-44.8 - (-93.82))^2 + (-51.9 - 9.813)^2]^{0.5}$$

cuyo valor es 107.

El menor valor es 46 y corresponde a la configuración denominada TC1. El segundo valor más bajo es 57 para la configuración C4, y así sucesivamente hasta los 78 casos posibles.

Por tanto, a esta estructura, podemos asignarle una conformación *twist chair* en la que, además, sabemos que los ángulos de torsión tienen el orden correspondiente a TC1, es decir, **37.3, -109.3, 109.3, -37.3, -37.3, 109.3, -109.3 y 37.3** (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 5° el valor calculado para ese intervalo varía entre 0 y $[8 \times (5 - 0)^2]^{0.5} = 14$.

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

Variación de la deformación (°)	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

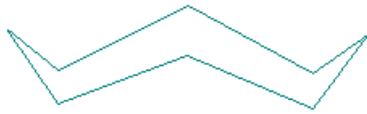
Por tanto, el valor de 46 obtenido para la conformación objeto de nuestro estudio se encuentra en el intervalo $43 \rightarrow 56$ correspondiente a una deformación comprendida entre $15 \rightarrow 20^\circ$ (16° aproximadamente). En definitiva, la conformación más probable la denominaremos “TC1 deformada más de 16° ”.

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

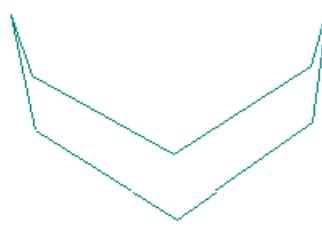
Las figuras correspondientes a las 10 conformaciones del ciclooctano (ver las dos páginas siguientes) se crearon mediante el software para modelado molecular *Hyperchem Release 7.01* (versión *Windows*)⁵⁴. Para ello, primero se construyó un anillo de ocho miembros mediante las opciones *default element* y *model build* desde el menú *BUILD*. Seguidamente, seleccionando los valores de los ángulos de torsión propuestos por Hendrickson³⁸, se crearon las distintas formas canónicas mediante la opción *constrain bond torsion* del mismo menú. Una vez fijados todos los ángulos de torsión para una figura determinada, se seleccionó la opción *add hydrogen & model build* dentro del menú *BUILD*. Así se obtuvieron, uno a uno, los 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.

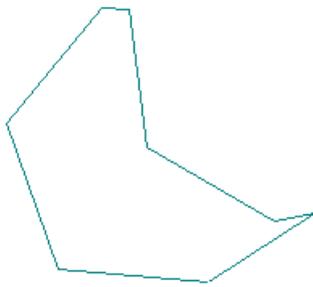
(*) HyperchemTM; Hypercube Inc. : 1115 NW 4th Street, Gainesville, Florida 32601, USA.



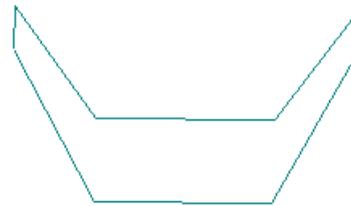
CROWN



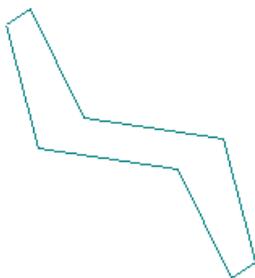
BOAT- BOAT



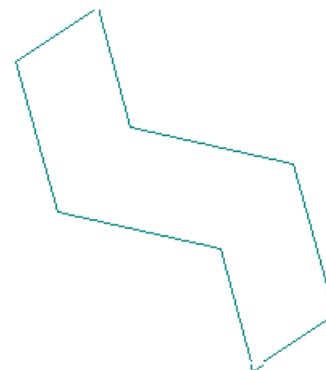
TWIST BOAT (SOFA)



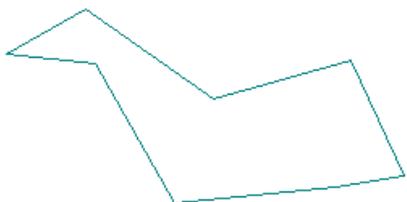
BOAT



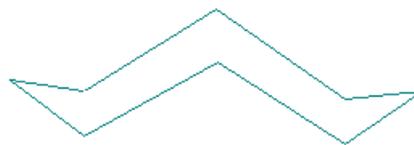
CHAIR



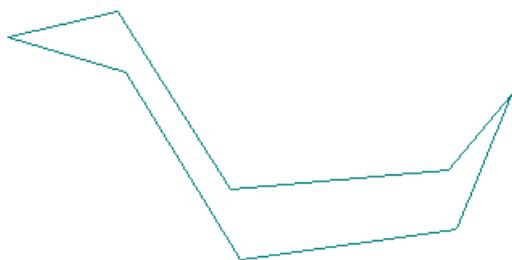
TWIST-CHAIR



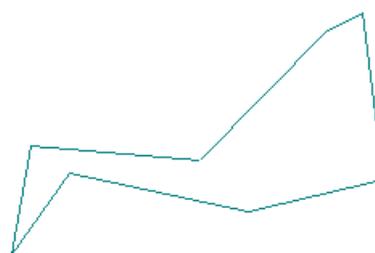
TWIST-CHAIR-CHAIR



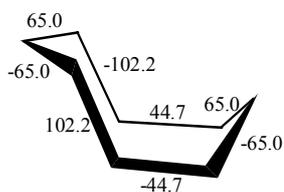
CHAIR-CHAIR



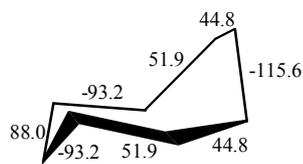
BOAT-CHAIR



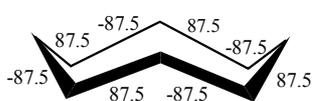
TWIST-BOAT-CHAIR



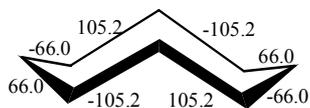
Boat-Chair (C_3)



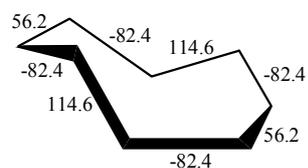
Twist-Boat-Chair (C_2)



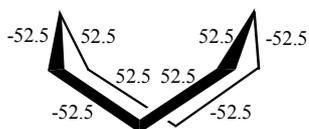
Crown (D_{4d})



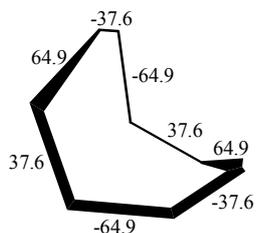
Chair-Chair (C_{2v})



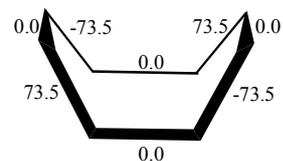
Twist-Chair-Chair (D_2)



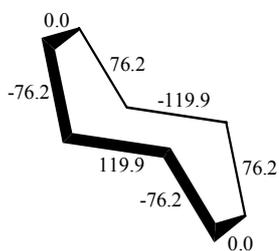
Boat-Boat (D_{2d})



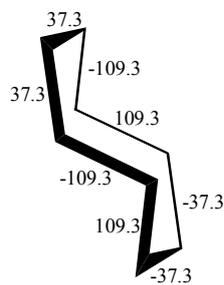
Twist-Boat (S_4)



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 87 compuestos seleccionados según la búsqueda comentada anteriormente, presentándolos uno a uno de la forma que se recoge en la Figura 37 para el compuesto de *refcode* SOSWIG:

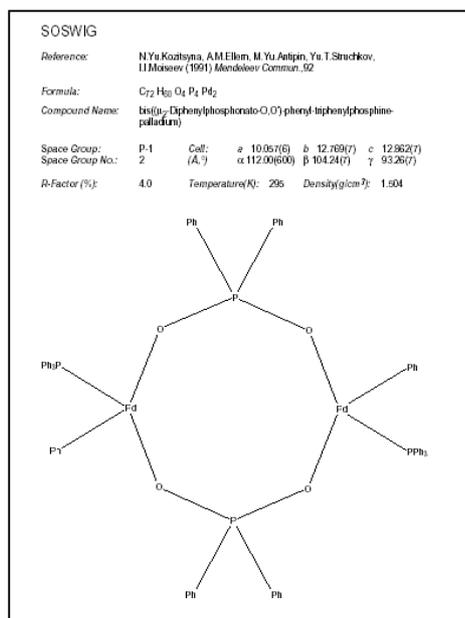


Figura 37.- Presentación de datos para la estructura de *refcode* SOSWIG

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 87 complejos dinucleares que presentan doble puente con la función fosfinatos, desechando, por tanto, los fosfatos y los fosfonatos, que no serán objeto de nuestro estudio. En la Tabla 6 se presentan los *refcode* de los 87 compuestos (ver página siguiente).

<i>Refcode</i>	<i>Refcode</i>	<i>Refcode</i>
ACAWEG	IFEJOS	TATYES
ADIBUK	JORXUJ	TAVYOE
ADICAR	JOSPUC	TAVYUK
ADICEV	JOSPUC10	TIQMUB
ADICIZ	JUMKEH	TIRXUN
BICJAY	KEGHAF	TIXKEQ
BISCEL	LEHLOZ	TIXLER
BOWBIY	LEYRUC	VACJIS
BOXBIZ	MEFKAJ	VACJOY
BUBQOE	MEFKEN	VAQNAC
CAJTOW	MPCTRE	VEHMOK
CLPSSB	NAGKAH	VEHNAX
DBUPCU	NAPRIF	VELMEE
DPINRE	NIMWAH	WACRIB
DPPOPB10	NIMWOV	WACROH
ECIGUS	NULZID	XAHHET
GAWZAF	NULZOJ	XAPREL
GIDMIP	PHACCR	XAWQAN
GOMPIH	PHACCR01	XEPRUF
GOPPAC	PHBPMN	XIKSIT
GOPPAC01	POWCOT	YEYJIV
HEQCAH	QEDKAL	YEYJOB
HOYKIP	QOBKOH	YOMDOT
HOYKOV	RELLOJ	ZAZZUV
HOYKUB	RELLUP	ZIRMES
HOYLAI	RUQHUG	ZOWMON
HOYLEM	SIRCEB	ZOZJUT
HOYLIQ	SOSWIG	ZUHCAG
HOYLOW	SUZCUL	ZUHCUA

Tabla 6.- refcode de los 87 compuestos seleccionados