

**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial**



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

**Titulación:** Ingeniería Técnica Industrial  
**Especialidad:** Química Industrial  
**Alumno/a:** Adrián García Ortiz  
**Director/a/s:** Luis García González  
Eduardo Pérez Pardo

Cartagena, septiembre de 2009

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

Memoria presentada en la Escuela  
Técnica Superior de Ingeniería  
Industrial de la Universidad  
Politécnica de Cartagena para optar  
al grado de Ingeniero Técnico  
Industrial en la especialidad de  
Química Industrial.



**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MINERA,  
GEOLÓGICA Y CARTOGRÁFICA**

---

**ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA**

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

**HACEN CONSTAR:**

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

Cartagena, 30 de SEPTIEMBRE de 2009

Fdo.: Luis García González

Fdo.: Eduardo Pérez Pardo

## AGRADECIMIENTOS

Este proyecto se lo podría agradecer a mucha gente. Sin embargo, tal atrevimiento le quitaría protagonismo a la persona que realmente le muestro mi gratitud. Ese señor es D. Luis García González, al que le estaré eternamente agradecido por haberse involucrado tanto y haberme hecho este Proyecto muy ameno y llevadero. Hacer el Proyecto Fin de Carrera con usted fue la decisión más acertada que pude tener.

    Mi más sincero agradecimiento.

# CAPÍTULO I

# CAPÍTULO II

# CAPÍTULO III

# CAPÍTULO IV

# CAPÍTULO V

# APÉNDICES

# ÍNDICE

	Página
<b>I.- INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
I.1.- ARTÍCULO DE DACRUZ Y ZIMMER.....	2
I.1.1.- Antecedentes.....	1
I.1.2.- Sección Experimental.....	5
I.1.3.- Resultados y Discusión.....	5
I.2.- ESTUDIO ESTRUCTURAL DE DIAMINAS DE COBALTO.....	7
I.3.- SIMETRÍA.....	9
I.4.- ÁNGULOS DE TORSIÓN.....	22
I.5.- OBJETIVOS Y ESTRUCTURACIÓN DEL TRABAJO.....	25
Bibliografía I.....	26
<b>II.- METODOLOGÍA .....</b>	<b>27</b>
II.1.- MEDIOS A UTILIZAR.....	27
II.1.1.- Base de Datos CSD .....	27
II.1.1.1.- Programa <i>ConQuest</i> .....	28
II.1.1.2.- Programa <i>Mercury</i> .....	31
II.1.2.- Programas específicos.....	35
II.1.2.1.- Métodos Bayesianos para la clasificación conformacional de anillos de seis miembros.....	35
II.1.2.2.- Método para la asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas.....	39
II.1.3.- Las 6 conformaciones del ciclohexano generadas por el programa <i>Hyperchem</i> <sup>TM</sup> .....	42
II.2.- SELECCIÓN DE LAS ESTRUCTURAS.....	44
Bibliografía II.....	45

<b>III.- ESTUDIO CONFORMACIONAL DEL CICLOHEXANO Y DE LOS COMPUESTOS OBJETO DE ESTUDIO.....</b>	<b>47</b>
III.1.- EL CICLOHEXANO.....	47
III.1.1.- Rutas de interconversión en el ciclohexano.....	50
III.1.2.- Simetría de las distintas conformaciones.....	56
III.2.- EXPANSIÓN DE CONFIGURACIONES CANÓNICAS DEL CICLOHEXANO. APLICACIÓN A LOS COMPUESTOS OBJETO DE ESTUDIO.....	58
III.2.1.- Introducción.....	58
III.2.2.- Cálculo teórico (matemático).....	61
III.2.3.- Cálculo teórico (conformacional).....	63
III.2.4.- Rutas de interconversión en los compuestos seleccionados.....	75
III.2.5.- Esquema de interconversión .....	84
Bibliografía III.....	84
<b>IV.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>85</b>
IV.1.- APLICACIÓN DEL MÉTODO DE CLASIFICACIÓN.....	85
IV.2.- APLICACIÓN DEL PROGRAMA DEL ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA.....	92
IV.3.- AMPLIACIÓN DEL MÉTODO JERÁRQUICO CON DISTINTA VARIANZA A LOS COMPLEJOS DE PALADIO CON LIGANDOS NN, <sub>[1]</sub> ....	121
<b>V.- CONCLUSIONES.....</b>	<b>131</b>

## **I.- INTRODUCCIÓN**

Este Proyecto Fin de Carrera es la continuación del llevado a cabo en diciembre de 2007 titulado *Estudio estructural de anillos de 6 miembros de diaminas de cobalto(III)*, basado, a su vez, en el artículo [DaCruz, 1996] *Clusters and Molecular Mechanical Analysis of the Conformations of All Six-Membered Cobalt(III) Diamine Rings in the Cambridge Structural Database*.

El desarrollo del citado Proyecto se limitó a las diaminas de cobalto(III) con la finalidad de seguir la estructura del artículo de DaCruz, con datos actualizados y utilizando nuestros programas. El elevado número de complejos a estudiar nos aconsejó no ampliarlo a otros átomos dadores. Creemos que ahora es el momento de desarrollarlo pero cambiando el metal cobalto por los metales del grupo 10 que son los que habitualmente utilizamos en el Área de Química Inorgánica. Por tanto, vamos a estudiar los anillos saturados de 6 miembros de níquel, paladio y platino con todos los ligandos dadores posibles.

La búsqueda realizada previamente nos revela que el número de compuestos y fragmentos de diaminas de níquel es superior al de los de cobalto estudiados anteriormente; esto, añadido a los datos de los restantes casos nos aconseja dividir el estudio en dos Proyectos Fin de Carrera: uno con ligandos quelato simétricos (N-N, P-P, etc.) y otro con asimétricos (N-P, N-O, etc.). Nosotros vamos a desarrollar el primer caso, ligandos quelato dispuestos simétricamente.

### **I.1.- ARTÍCULO DE DACRUZ Y ZIMMER**

En él se utiliza un método aglomerativo, *single-link clustering*, para separar todas las diaminas de cobalto(III) de anillos de seis miembros encontradas en la CSD [Allen, 1991; Allen, 1983] en conformaciones *chair*, *boat*, *unsymmetric twist-boat* y  $\delta$  y  $\lambda$  *twist-boat*. La importancia de esta publicación radica en el hecho de que hasta ese momento, el análisis de *clusters* sólo se había utilizado en el estudio de grandes biomoléculas [Gautheret, 1993; Holm, 1993] y en dinámica molecular [Karpen, 1993; Gordon, 1992] pero no en la investigación de complejos inorgánicos.

### I.1.1.- Antecedentes

En la introducción del artículo, los autores señalan los antecedentes previos a su investigación:

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

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

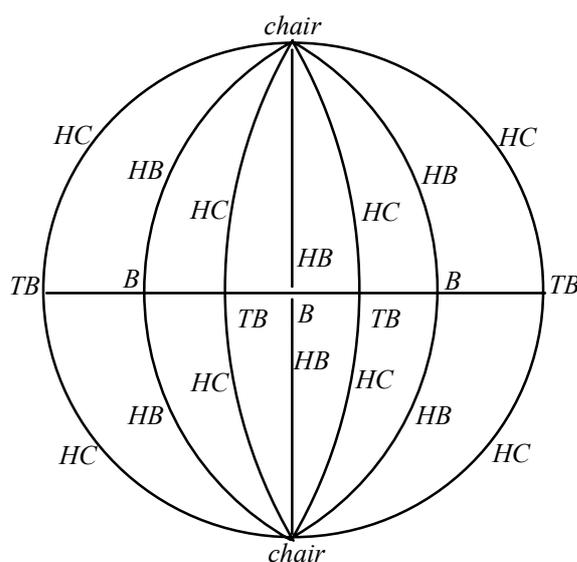


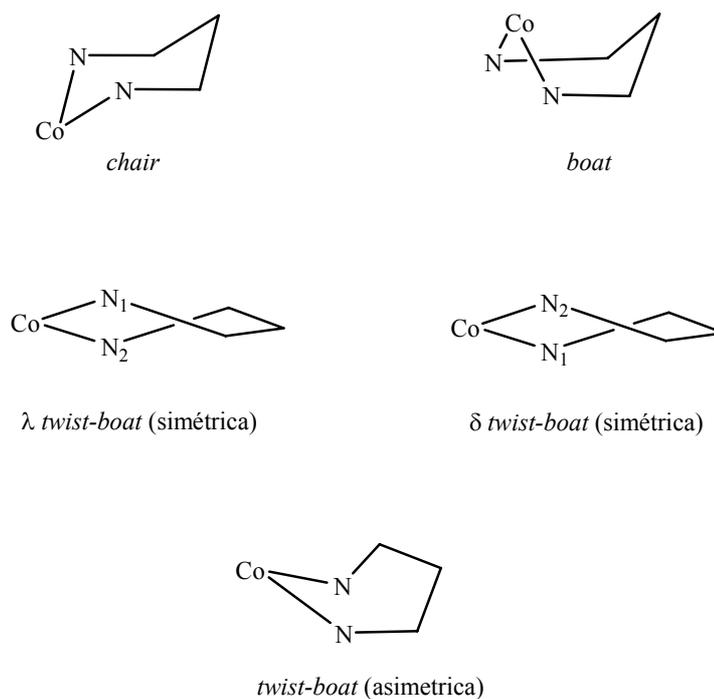
Figura 1.- Mapa esférico de energía

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

### I.1.2.- Sección Experimental

Utilizando la función *quest* de la CSD, los autores encontraron y salvaron todas las estructuras que contenían cobalto(III) unido a propanodiamina y derivados de la propanodiamina, donde ambos nitrógenos y todos los carbonos del anillo están hibridados  $sp^3$ , como se ve en la Figura 3:

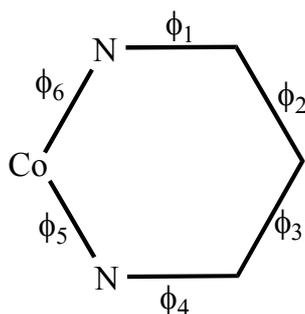


Figura 3

La búsqueda la efectuaron con la versión 5.07 de la CSD de abril de 1994, que contenía 120481 estructuras. Todas las estructuras se realizaron con factores R menores que 10.00. Obtuvieron un total de 180 compuestos (*refcode*). Eliminaron todos los átomos no pertenecientes a anillos de seis miembros de diaminas de cobalto(III), y cada

anillo de seis miembros lo llevaron a un gran archivo. Renumeraron los átomos de forma consistente y obtuvieron un archivo con 208 anillos (muchas estructuras contenían más de un anillo de seis miembros, por lo que había más anillos de seis miembros, fragmentos, que estructuras de cobalto(III), compuestos). Con algunas consideraciones más llegaron a los resultados.

### I.1.3.- Resultados y Discusión

Los algoritmos que utilizaron intentaban encontrar agrupamientos en los que las similitudes dentro de un grupo fueran significativamente más grandes que entre distintos grupos. Dentro de los muy diferentes métodos de *clustering*, ellos utilizaron el método Jerárquico *singlelink clustering* que es de tipo aglomerativo, lo que significa que se parte de conformaciones separadas que se unen en *clusters*. Si un par conformaciones están muy próximas en el espacio conformacional, se unen en un *cluster (single link)*, y si el par de las conformaciones más cercanas están en *clusters* adyacentes, se fusionan (jerárquico). Aunque éste es un método efectivo de agrupar conformaciones, tiene su marcha atrás pues *clusters* separados pueden llegar a ser unidos por estructuras aisladas que hacen de puente entre los miembros más exteriores de los dos *clusters* [Torda, 1994]. En este estudio agruparon conformaciones de anillos de seis miembros derivados de estructuras cristalinas y asumieron que éstas son las conformaciones de menor energía. Si las conformaciones de menor energía están separadas, por una barrera de energía grande, por ejemplo, la barrera entre las conformaciones *boat* y *chair*, la unión de *clusters* por las conformaciones más externas en *clusters* tipo *single-linkage* no son un problema. No obstante, si la barrera de energía es pequeña como es el caso entre las conformaciones *boat* y *twist-boat*, *clusters* separados pueden ser unidos por las conformaciones más externas que cruzan la barrera de energía y el agrupamiento *single-linkage* puede no ser el apropiado. Los autores demostraron que esto no era un problema en los anillos de seis miembros de diaminas de cobalto(III) y que este agrupamiento *single-linkage* puede distinguir entre las conformaciones idealizadas de anillos de seis miembros recogidos en una figura anterior.

Los resultados obtenidos son:

- 80% de conformaciones *chair* o *chair* deformadas (166/208). Con una energía media de 9.89 kJ/mol.

- 10% de  $\lambda$  y  $\delta$  *twist-boat* (21/208), 21.62 kJ/mol.
- 8% de *boat* (17/208), 59.75 kJ/mol.
- 2% de *twist-boat* asimétrica (4/208), 26.25 kJ/mol.

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

Nosotros debemos añadir que para los mismos *refcode* utilizados en esta publicación y con las mismas condiciones de búsqueda (factor  $R < 10$ ) encontramos 355 fragmentos. No tenemos datos concretos de cómo se llevó a cabo la depuración hasta los 208 fragmentos por lo que mantenemos nuestra búsqueda con la finalidad de compararla con otra actualizada. Tampoco merece la pena realizar comparaciones entre los métodos empleados por los autores y los nuestros ya que no coinciden ni el número de conformaciones que utilizan como base del estudio. Hoy día son seis, como veremos con detalle más adelante.

## **I.2.- ESTUDIO ESTRUCTURAL DE DIAMINAS DE COBALTO (PROYECTO FIN DE CARRERA)**

Sobre la base del artículo de DaCruz y Zimmer de 1996, resumido en el apartado anterior, en 2007 se llevó a cabo en el Área de Química Inorgánica de la UPCT un Proyecto Fin de Carrera en el que se mejoraban los medios de investigación y se ampliaban los datos objeto de estudio habida cuenta del tiempo transcurrido.

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

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

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

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

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

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

### I.3.- SIMETRÍA

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 ión 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 ión 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 ión 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  $180^\circ$  ( $\pi$  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.

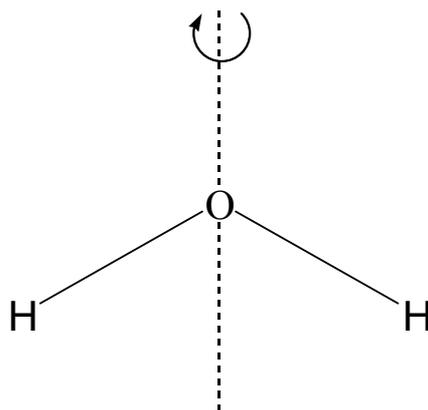


Figura 4.- Molécula de agua, H<sub>2</sub>O

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 4) posee un eje de simetría binario  $C_2$ , y la molécula plana BF<sub>3</sub> un eje ternario  $C_3$ , perpendicular al plano molecular y tres ejes binarios  $C_2$  según cada enlace B–F (Figura 5):

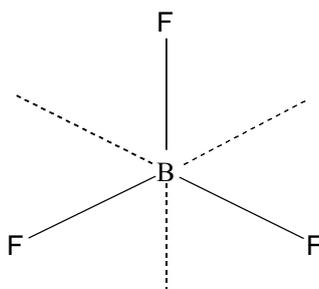


Figura 5.- Molécula plana BF<sub>3</sub>

2.- Reflexión respecto de un plano de simetría (plano especular),  $\sigma$ .

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  $\nu$ . El plano  $\sigma_\nu$  es perpendicular al plano de la molécula, denominado  $\sigma'_\nu$  (dando por supuesto que los átomos individuales son simétricos respecto del plano molecular). Como ejemplo, la molécula  $\text{BF}_3$  (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  $[\text{ICl}_4]^-$  tiene un centro de simetría mientras que la molécula tetraédrica  $\text{CCl}_4$  no lo posee (Figura 6):

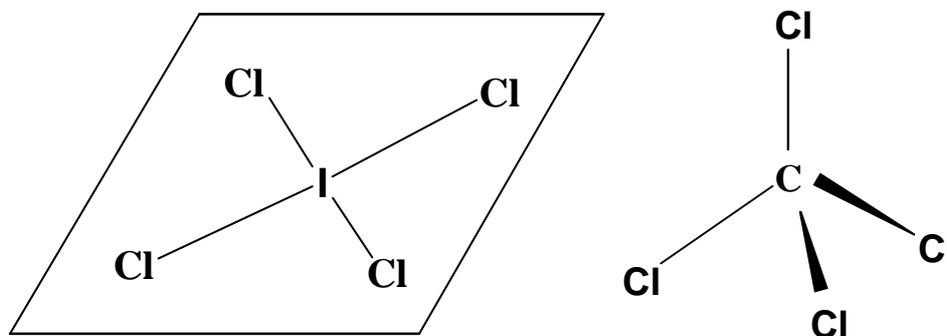


Figura 6.- Ion plano  $[\text{ICl}_4]^-$  y molécula tetraédrica  $\text{CCl}_4$

### 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  $\text{CH}_4$  tiene tres ejes  $S_4$  coincidentes con los tres ejes  $C_2$  que bisecan los ángulos HCH. En la Figura 7 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.

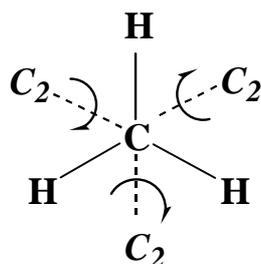


Figura 7.- Molécula  $\text{CH}_4$  vista desde uno de los enlaces C-H (se omite el H por claridad)

### 5.- Operación identidad, E.

La operación de rotación de  $2\pi$  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 8 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.

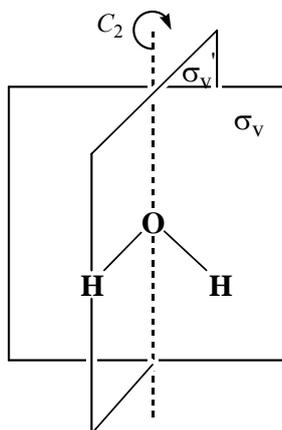


Figura 8.- Elementos de simetría de la molécula de agua

La molécula de agua y todas aquellas moléculas, objetos o conjuntos de puntos que posean las propiedades de simetría reflejadas en la Figura 8 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	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
E	E	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$C_2$	$C_2$	E	$\sigma_v'$	$\sigma_v$
$\sigma_v$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$	E	$C_2$
$\sigma_v'$	$\sigma_v'$	$\sigma_v$	$C_2$	E

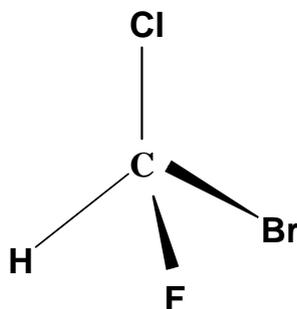
Tabla 1

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  $360^\circ$  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  $\text{CHFClBr}$  (Figura 9) es un ejemplo de molécula perteneciente a este grupo:

Figura 9.- Molécula  $\text{CHFClBr}$

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 10) o  $\text{SO}_2\text{ClF}$ :

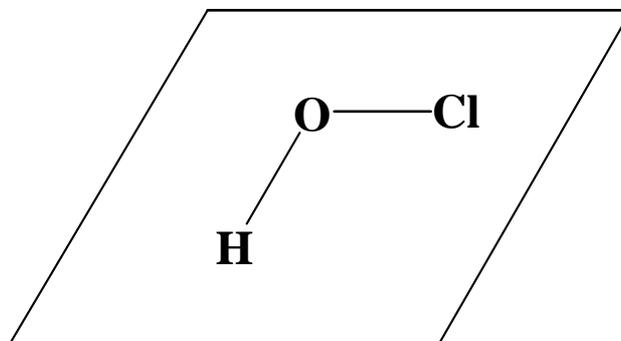


Figura 10.- Molécula HOCl

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,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , 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 11. 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  $C_2$ .

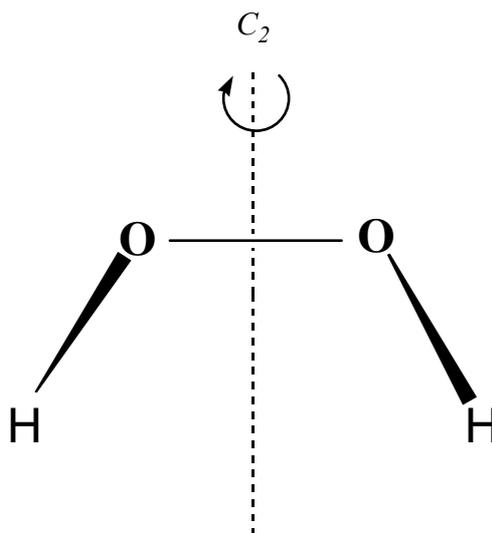


Figura 11.- Molécula  $\text{H}_2\text{O}_2$

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 4 y 8) y de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (Figura 12), que pertenecen al grupo  $C_{2v}$ :

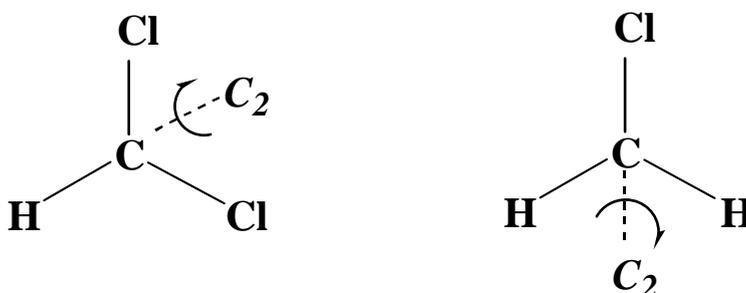


Figura 12. -Molécula  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , vista desde el enlace C-H y C-Cl (se omiten H y Cl respectivamente)

El amoníaco, el cloroformo ( $\text{CHCl}_3$ ), y el clorometano ( $\text{CH}_3\text{Cl}$ ), Figura 13, 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  $\text{CHCl}_3$  y  $\text{CH}_3\text{Cl}$  y ocurre igual que en el amoníaco, pero sustituyendo N-: por C-H y C-Cl, respectivamente:

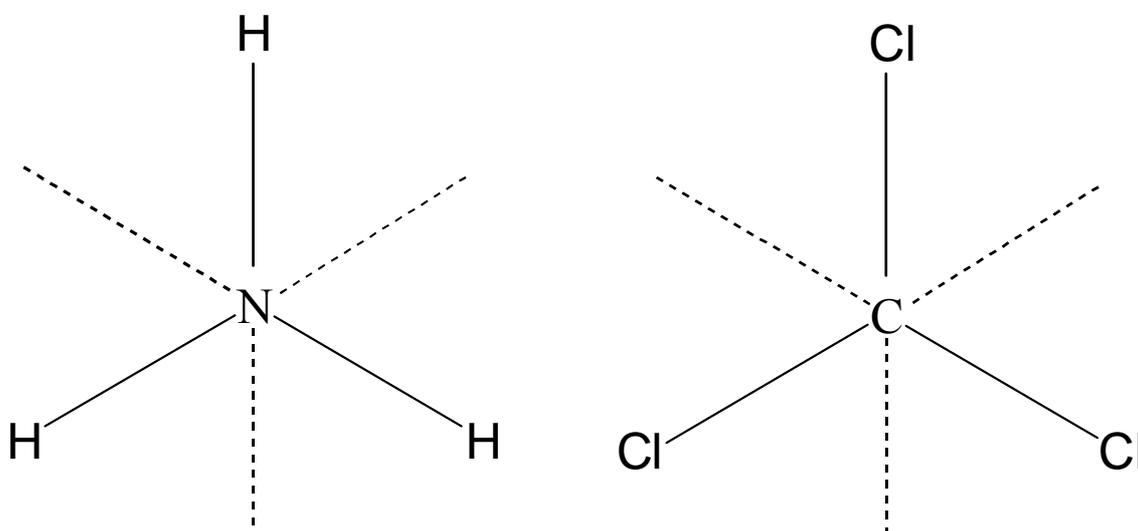


Figura 13.- Moléculas de amoníaco y cloroformo ( $\text{CHCl}_3$ )

La molécula de  $\text{BrF}_5$  (Figura 14) pertenece al  $C_{4v}$ : tiene un eje  $C_4$ , perpendicular al plano del papel, que coincide con la dirección de uno de los enlaces Br-F y cuatro planos que contienen a dicho eje:

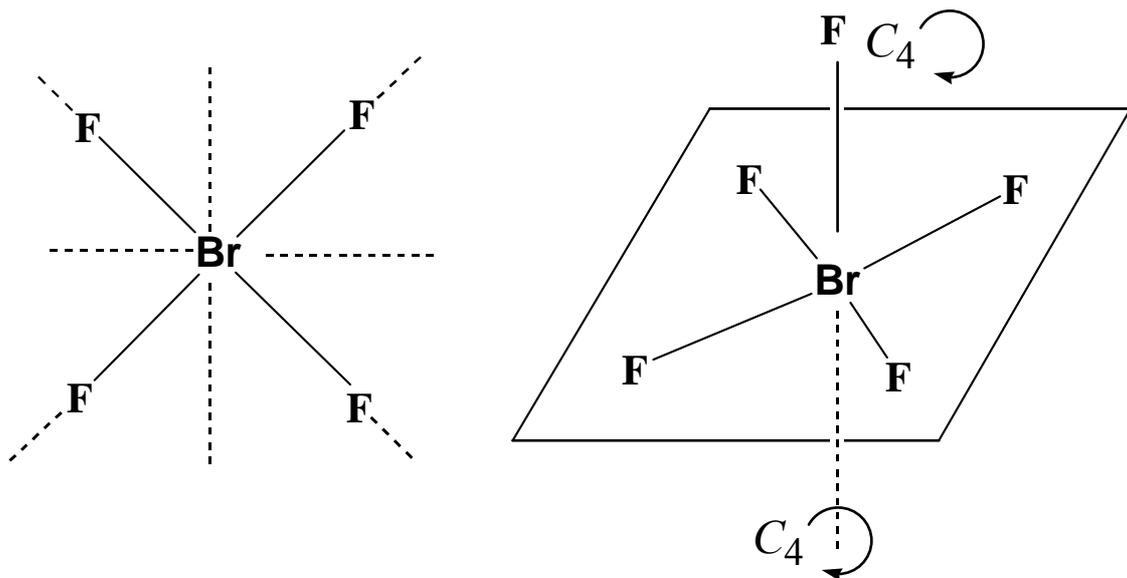


Figura 14.- Molécula de  $\text{BrF}_5$

Las moléculas lineales asimétricas  $\text{HCl}$ ,  $\text{HCN}$  y  $\text{OCS}$  pertenecen al grupo puntual  $C_{\infty v}$ : poseen un eje  $C_1$  (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  $\sigma_h$ ), el grupo puntual es  $C_{nh}$ .

El compuesto *trans*- $\text{CHCl}=\text{CHCl}$  (Figura 15) pertenece al grupo puntual  $C_{2h}$  ya que tiene un eje  $C_2$  perpendicular al plano del papel, que es el plano de simetría:

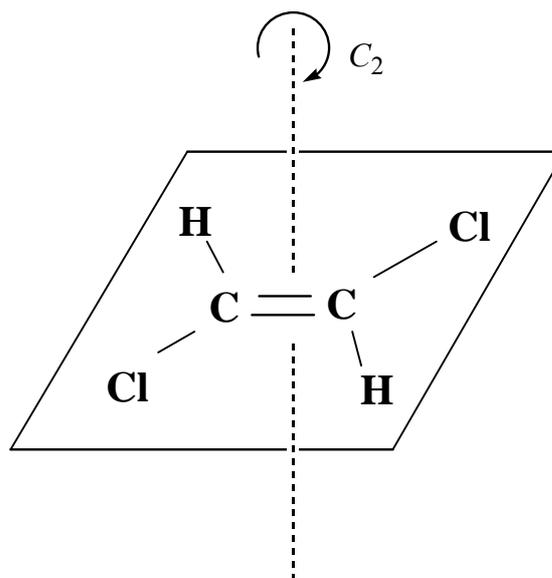


Figura 15.- Molécula de *trans*-1,2-dicloroeteno

El ácido bórico,  $B(OH)_3$ , molécula plana (Figura 16), pertenece al grupo puntual  $C_{3h}$  ya que tiene un eje  $C_3$  perpendicular al plano de simetría:

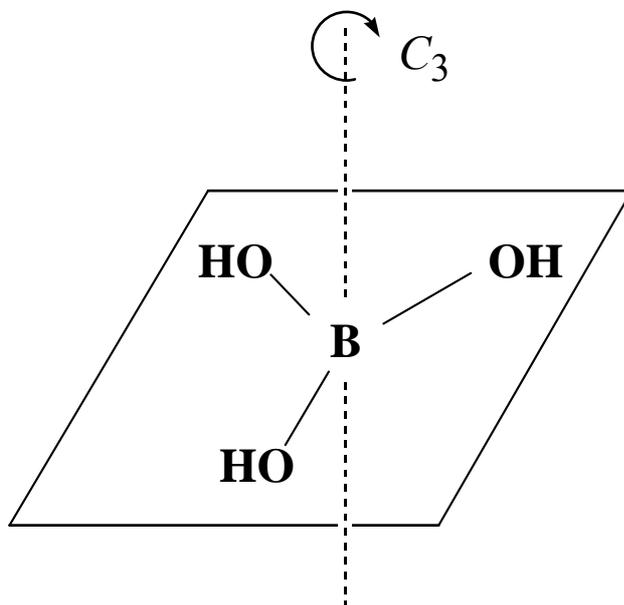


Figura 16.- Molécula de ácido bórico

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 ión  $[Co(en)_3]^{3+}$ , 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:

- Diborano,  $B_2H_6$  ( $D_{2h}$ ) (Figura 17): 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:

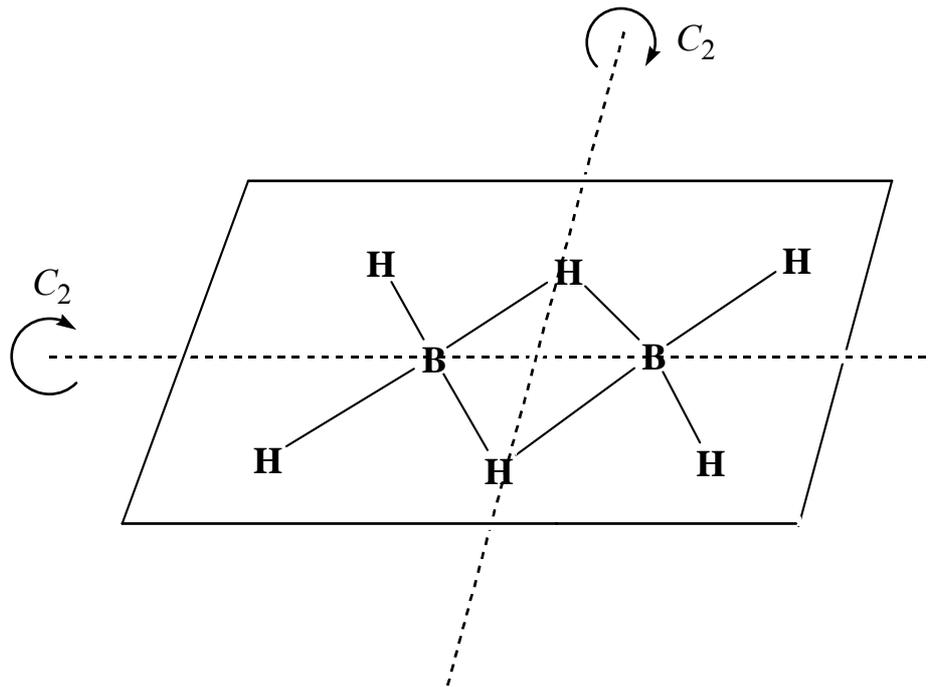


Figura 17.- Molécula de diborano

- b)  $\text{BCl}_3$  ( $D_{3h}$ ),
- c)  $[\text{BrF}_4]^-$  ( $D_{4h}$ ) y
- d) Benceno,  $\text{C}_6\text{H}_6$  ( $D_{6h}$ ) (Figura 18), 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:

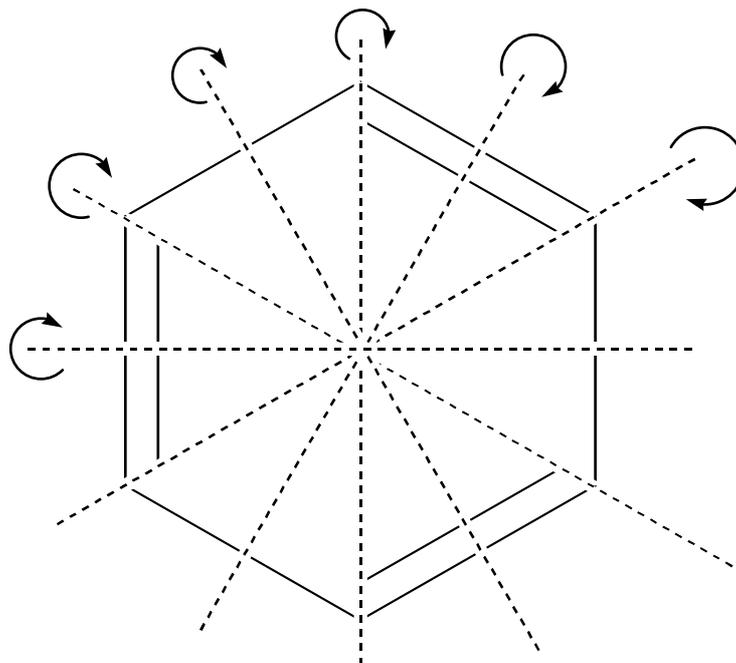


Figura 18.- Molécula de benceno

Una molécula lineal simétrica como  $\text{CO}_2$  o  $\text{Cl}_2$  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*,  $\sigma_d$ ), 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,  $\text{CH}_4$ , 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 19 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):

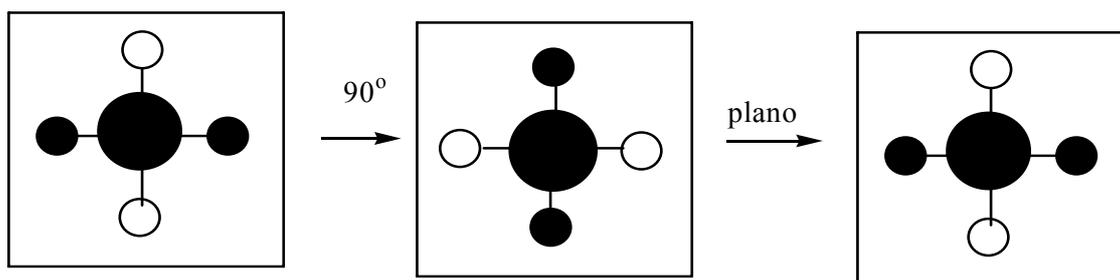


Figura 19.- Operación de simetría  $S_4$  aplicada al  $\text{CH}_4$

El cubo y el octaedro regular ( $\text{SF}_6$ , 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 que no vamos a recoger aquí ya que no aparecen en el estudio que vamos a realizar.

Para concluir, en la Figura 20 se expone un esquema que permite la deducción de grupos puntuales de moléculas e iones.

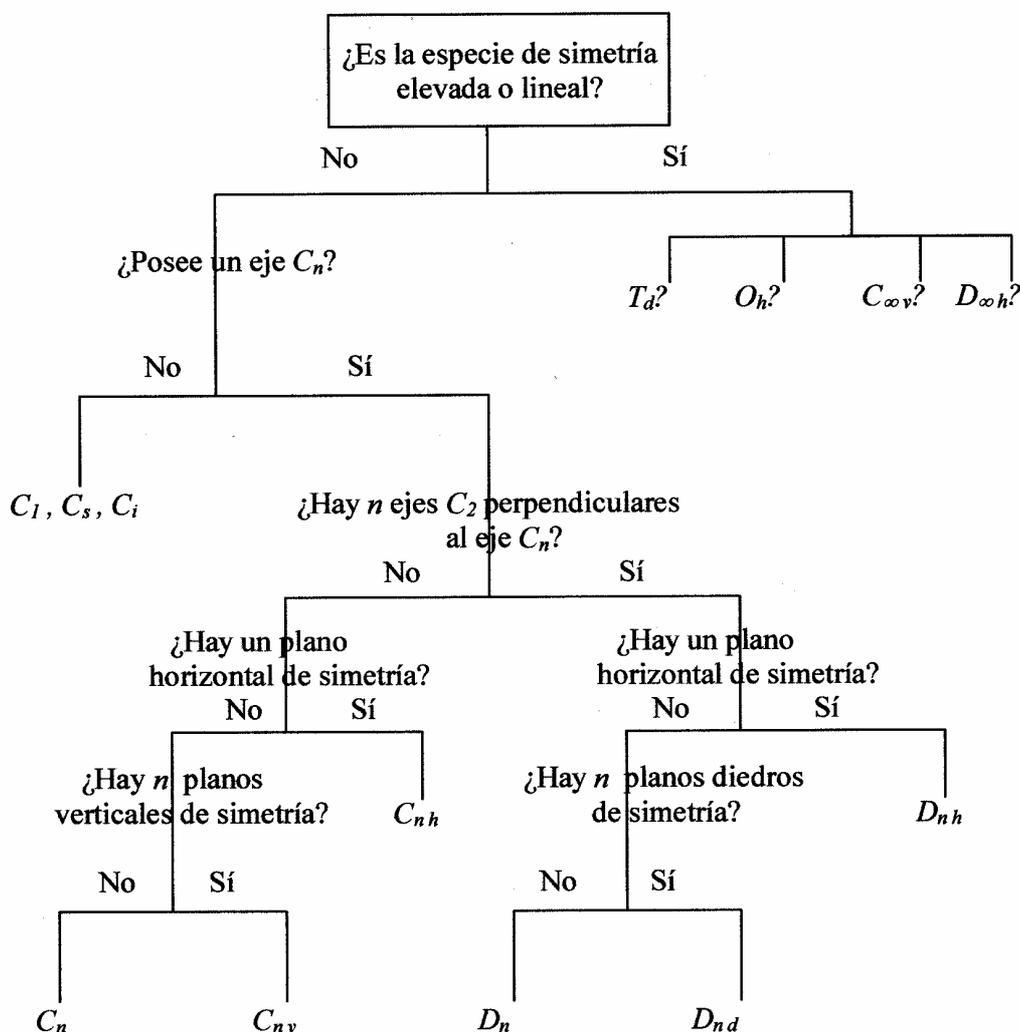


Figura 20

Tabla 2

Grupos puntuales	Elementos de simetría											
$C_1$	$E$											
$C_s = C_h$	$E$	$\sigma_h$										
$C_i = S_2$	$E$	$i$										
$C_2$	$E$	$C_2$										
$C_3$	$E$	$C_3$	$C_3^2$									
$C_4$	$E$	$C_4$	$C_2$	$C_4^3$								
$C_5$	$E$	$C_5$	$C_5^2$	$C_5^3$	$C_5^4$							
$C_6$	$E$	$C_6$	$C_3$	$C_2$	$C_3^2$	$C_6^5$						
$C_7$	$E$	$C_7$	$C_7^2$	$C_7^3$	$C_7^4$	$C_7^5$	$C_7^6$					
$C_8$	$E$	$C_8$	$C_4$	$C_8^3$	$C_2$	$C_8^5$	$C_4^3$	$C_8^7$				
$D_2$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$								
$D_3$	$E$	$2C_3$	$3C_2$									
$D_4$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2C''_2$							
$D_5$	$E$	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$								
$D_6$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3C'_2$	$3C''_2$						
$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$								
$C_{3v}$	$E$	$2C_3$	$3\sigma_v$									
$C_{4v}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$							
$C_{5v}$	$E$	$2C_5$	$2C_5^2$	$5\sigma_v$								
$C_{6v}$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$						
$C_{2h}$	$E$	$C_2$	$i$	$\sigma_h$								
$C_{3h}$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$						
$C_{4h}$	$E$	$C_4$	$C_2$	$C_4^3$	$i$	$S_4^3$	$\sigma_h$	$S_4$				
$C_{5h}$	$E$	$C_5$	$C_5^3$	$C_5^4$	$\sigma_h$	$S_5$	$S_5^7$	$S_5^3$	$S_5^9$			
$C_{6h}$	$E$	$C_6$	$C_3$	$C_2$	$C_3^2$	$C_6^5$	$i$	$S_3^5$	$S_6^5$	$\sigma_h$	$S_6$	$S_3$
$D_{2h}$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	$i$	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$				
$D_{3h}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_3$	$3\sigma_v$						
$D_{4h}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2C''_2$	$i$	$2S_4$	$\sigma_h$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
$D_{5h}$	$E$	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	$\sigma_h$	$2S_5$	$2S_5^3$	$5\sigma_v$				
$D_{6h}$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3C'_2$	$3C''_2$	$i$	$2S_3$	$2S_6$	$\sigma_h$	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
$D_{2d}$	$E$	$2S_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2\sigma_d$							
$D_{3d}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$i$	$2S_6$	$3\sigma_d$						
$D_{4d}$	$E$	$2S_8$	$2C_4$	$2S_8^3$	$C_2$	$4C'_2$	$4\sigma_e$					
$D_{5d}$	$E$	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	$i$	$2S_{10}^3$	$2S_{10}$	$5\sigma_d$				
$D_{6d}$	$E$	$2S_{12}$	$2C_6$	$2S_4$	$2C_3$	$2S_{12}^5$	$C_2$	$6C'_2$	$6\sigma_d$			
$S_4$	$E$	$S_4$	$C_2$	$S_4^3$								
$S_6$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$i$	$S_6^5$	$S_6$						
$S_8$	$E$	$S_8$	$C_4$	$S_8^3$	$C_2$	$S_8^5$	$C_4^3$	$S_8^7$				
$T$	$E$	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$								
$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$							
$T_h$	$E$	$4C_3$	$4C_3^2$	$3C_2$	$i$	$4S_6$	$4S_6^2$	$3\sigma_d$				
$O$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C'_2$							
$Oh$	$E$	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$i$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$		
$I$	$E$	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$							
$I_h$	$E$	$12C_5$	$12C_5^2$	$20C_3$	$15C_2$	$i$	$12S_{10}$	$12S_{10}^3$	$20S_6$	$15\sigma$		
$C_{\infty v}$	$E$	$C_2$	$2C_{\infty\phi}$	.....	$\infty\sigma_v$							
$D_{\infty h}$	$E$	$2C_{\infty\phi}$	.....	$\infty\sigma_v$	$i$	$2S_{\infty\phi}$	.....	$\infty C_2$				

#### I.4.- 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 21 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.

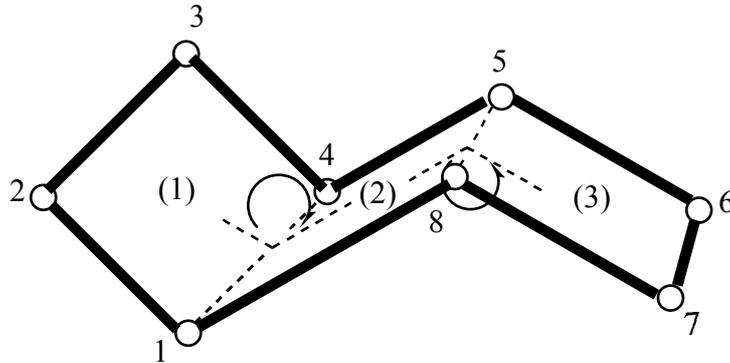


Figura 21

Un ángulo de *torsión* es un caso especial de ángulo diedro. Como se muestra en la Figura 22, 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.

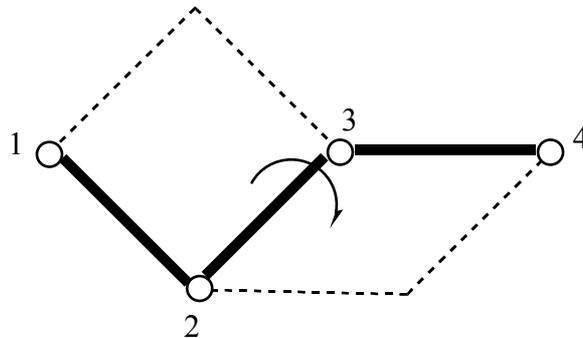
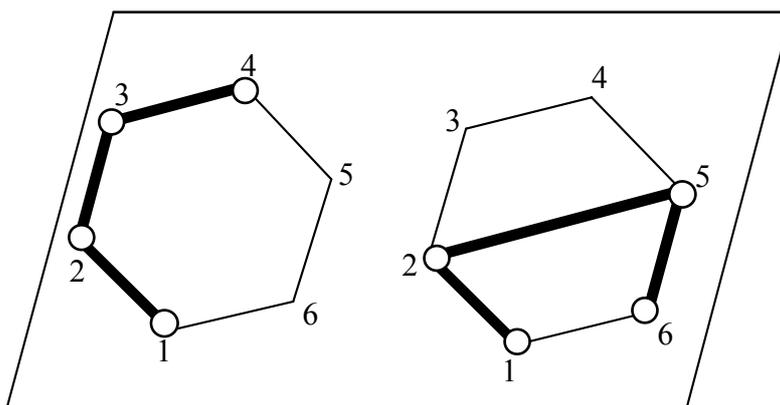


Figura 22

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.

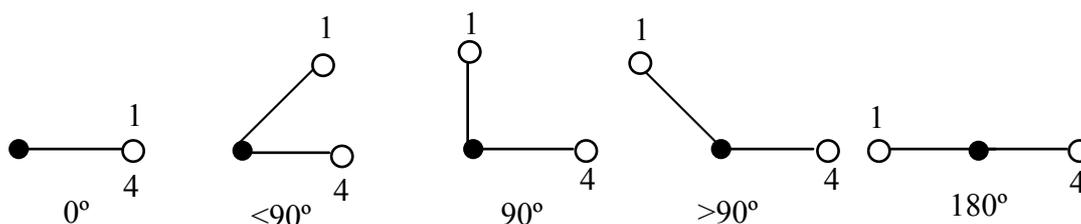
Si los átomos no están colocados de forma consecutiva en la estructura se denomina ángulo de torsión *impropio*. Como ejemplo, en la Figura 23, se muestra una estructura plana de seis átomos en la que se observan los dos casos mediante los ángulos de torsión 1, 2, 3, 4 y 1, 2, 5, 6.



**Figura 23**

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

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



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

En la Tabla 3 se recogen las 6 conformaciones del ciclohexano y sus ángulos de torsión característicos  $\tau_1$ - $\tau_6$  medidos en grados [Allen, 1991].

**Tabla 3.- Ángulos de torsión para las 6 conformaciones del ciclohexano**

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

C: *chair*

B: *boat*

TB: *twist-boat*

E: *envelope*

HC: *half-chair*

SB: *screw-boat*

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

## I.5.- OBJETIVOS Y ESTRUCTURACIÓN DEL TRABAJO

Los objetivos a alcanzar en el presente Proyecto son:

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

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

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

3.- Expandir las seis conformaciones canónicas del ciclohexano para nuestro sistema objeto de estudio y estudiar las diferentes rutas de interconversión.

4.- Aplicar el Método de Clasificación para establecer cuál es la configuración más probable que presenta cada estructura y, mediante un Programa del Área de Química Inorgánica, medir su grado de deformación.

5.- Aplicar los métodos estadísticos denominados Jerárquico y EM Clustering desarrollados por el profesor Kessler del Área de Estadística de la UPCT.

6.- Comparar los resultados obtenidos con los de otro Proyecto Fin de Carrera acerca de las diaminas de cobalto realizado en 2007 en el Área de Química Inorgánica de esta Universidad.

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 fragmento de 6 miembros que más se aproxime a una de las expandidas teóricamente posibles en nuestros complejos.

## Bibliografía I

- Allen, F. H.; Howard, J. A. K. & Pitchford, N. A.; "Symmetry- Modified Conformational Mapping and Classification of the Medium Rings from Crystallographic Data. IV. Cyclooctane and Related Eight-Membered Rings". *Acta Cryst.* **B52**, 1996, 882.
- Allen, F.H.; Davies, J. E.; Galloy, J.J.; Johnson, O.; Kennard, O.; MacCrae, C.F.; Mitchell, E.M.; Smith, J. M.; Watson, D. G. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **31**, 1991, 187.
- Allen, F.H.; Doyle, M.J.; Auf Der Heyde, T.P.E. *Acta Crystallogr.* **B47**, 1991, 412.
- Allen, F. H.; Kennard, O.; Taylor, R. *Acc. Chem. Res.* **16**, 1983,146.
- Allen, F.H. and Taylor, R. *Acta Cryst.* **B 47**, 1991, 404-412
- Allinger, N. L.; Hirsh, J.A.; Miller, M.A.; Tyminski, I.J.J. *Am. Chem. Soc.* **91**, 1969, 337.
- Columbus, I.; Cohen, S.; Biali, S. E. *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 1994, 10306.
- Conklin, D.; Fortier, S.; Glasgow, J. I. & Allen, F. H.. "Conformational Analysis from Crystallographic Data using Conceptual Clustering". *Acta Cryst.* **B52**, 1996, 535.
- DaCruz, M. F. and Zimmer, M. *Inorg. Chem.* **35**, 1996, 2872-2877.
- Dasgupta, S.; Tang, Y.; Moldowan, J. M.; Carlson, R. M. K.; Goddard, W. A., III. *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 1995, 6532.
- Gautheret, D.; Major, F.; Cedergren, R. *J. Mol. Biol.* **229**, 1993, 1049.
- Geue, R. J.; Snow, M. R. *J. Chem. Soc. A* 1971, 2981.
- Giralt, E. "Introducción a la estereoquímica de los compuestos orgánicos". Ed. Reverté, 1984.
- Gollogly, J. R.; Hawkins, J. *Inorg. Chem.* **11**, 1972, 156.
- Gordon, H. I.; Somorai, R.L. *Proteins: Struct.; Funct., Genet.* **14**, 1992, 249.
- Hambley, T. W.; Hawkins, C. J.; Palmer, J. A.; Snow, M. R. *Aust. J. Chem.* **34**, 1981, 45.
- Hambley, T. W.; Searle, G. H.; Snow, M. R. *Aust. J. Chem.* **35**, 1982, 1285.
- Hendrickson, J. B. *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 1967, 7047.
- Holm, L.; Sander, C. *J. Mol. Biol.* **233**, 1993, 123.
- Karpen, M. E.; Tobias, D.J.; Brooks, C. L.. III. *Biochemistry* **32**, 1993, 412.
- Niketic, S. R.; Woldbye, F. *Acta Chem. Scand.* **27**, 1973, 621.
- Niketic, S. R.; Woldbye, F. *Acta Chem. Scand.* **27**, 1973, 3811.
- Niketic, S. R.; Rasmussen, K.; Woldbye, F.; Lifson, S. *Acta Chem. Scand.* **A30**, 1976, 485.
- Sachse, H. *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **23**, 1890, 1363.
- Sharpe, A. G.; "Química Inorgánica". Ed. Reverté, 1993.
- Sieburth, S. M. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1994. 1663.
- Strauss, H. L. *J. Chem. Educ.* **48**, 1971, 221.
- Taylor, R.; Allen, F. H.; Burgi, H.-B., Dunitz, J. D., Eds.; VCH: Weinheim. *Structure and Correlation*, **23**, 1994, 624.
- Torda, A. E.; Van Gunsteren, W. F. *J. Comput. Chem.* **12**, 1994, 1331.

## II.- METODOLOGÍA

### II.1.- MEDIOS A UTILIZAR

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

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

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

Nuestra búsqueda la llevaremos a cabo con la versión 5.29, de noviembre de 2008, que contiene 423752 compuestos.

La información se organiza en tres categorías:

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

Los principales programas que permiten analizar esa información son:

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

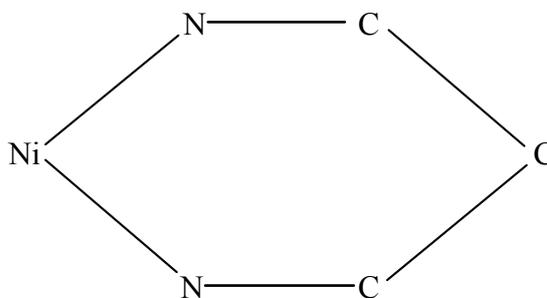
A cada entrada se le asigna un código o clave propio, *refcode*, compuesto de dos partes:

- 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.

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

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



**Figura 24**

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

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

- 1º) Selección del metal, níquel, paladio o platino en nuestro caso.
- 2º) Introducción de los restantes elementos: C y N, etc.
- 3º) Unión entre ellos hasta formar el esquema. En la pantalla del ordenador (Figura 25) aparecerá así:

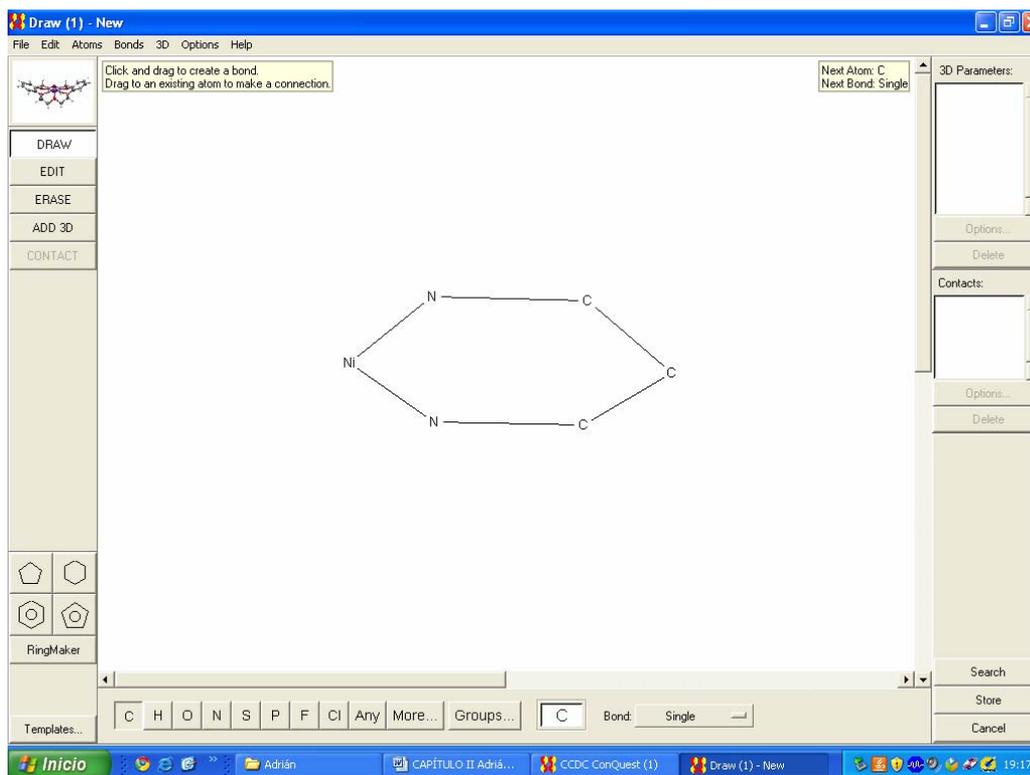


Figura 25

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 26.

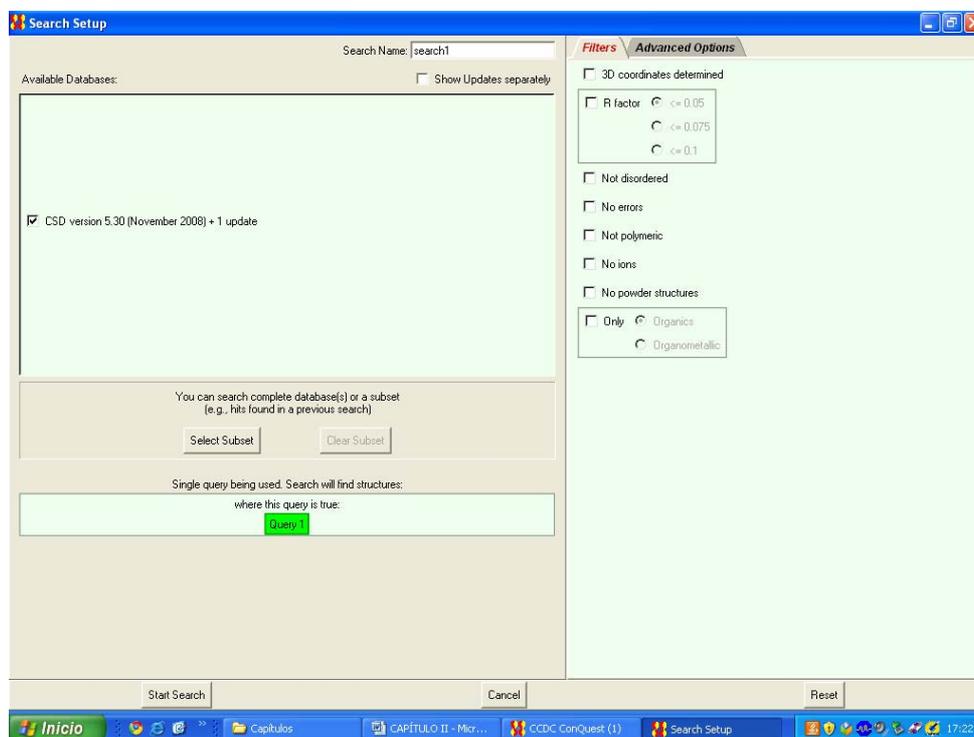


Figura 26

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 27:

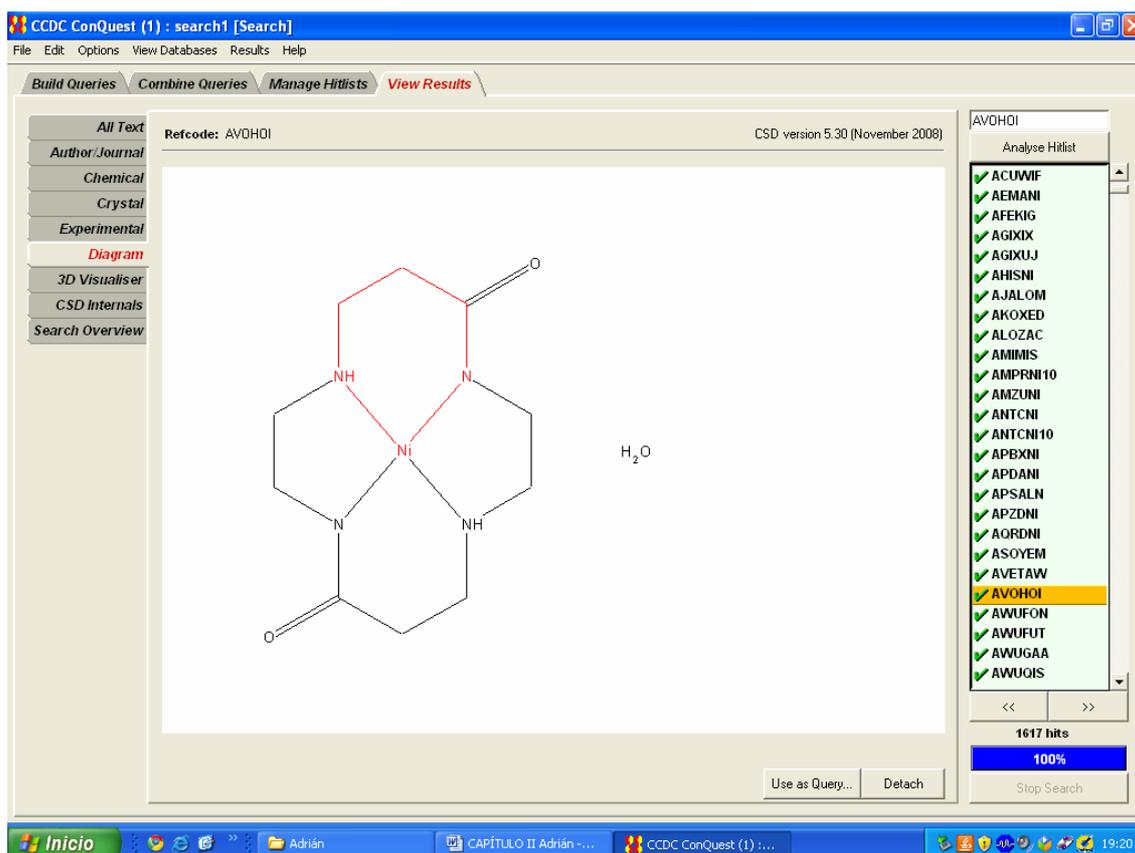


Figura 27

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.

En la parte central, según cuál sea la pestaña del lado izquierdo que tenemos activada, podemos observar la información correspondiente al compuesto seleccionado en la lista; así podemos acceder a información bibliográfica, química, cristalográfica o experimental, al diagrama bidimensional (como el de la figura), a la estructura tridimensional, a los datos de identificación y clasificación de la CSD o a las condiciones de búsqueda impuestas para seleccionarla.

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

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

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

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

A continuación se muestra la pantalla principal del programa en la Figura 28:

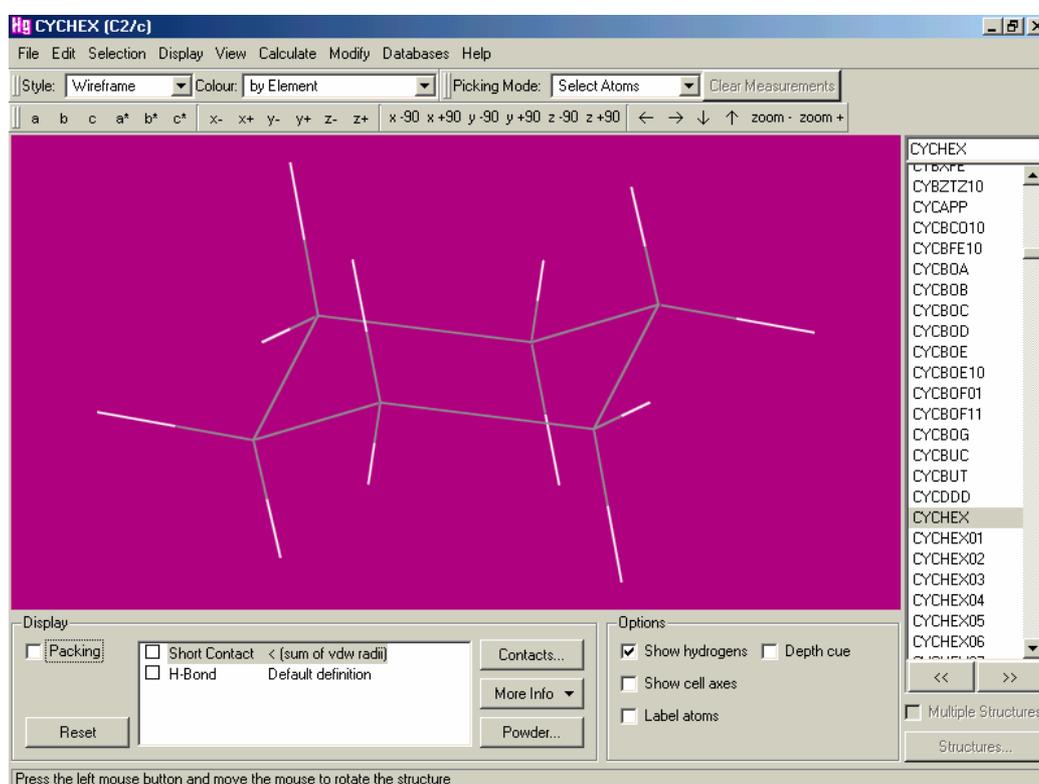


Figura 28

Entre las “operaciones” que ofrece destacan las siguientes (Figuras de la 29 a la 32):

- Visualizar estructuras cristalinas cuyos datos están guardados en diferentes formatos (*cif*, *pdb*, *mol*, etc.).

- Rotar y trasladar en la pantalla del ordenador estructuras cristalinas en 3D y visualizar sus ejes de celda y planos de Miller.

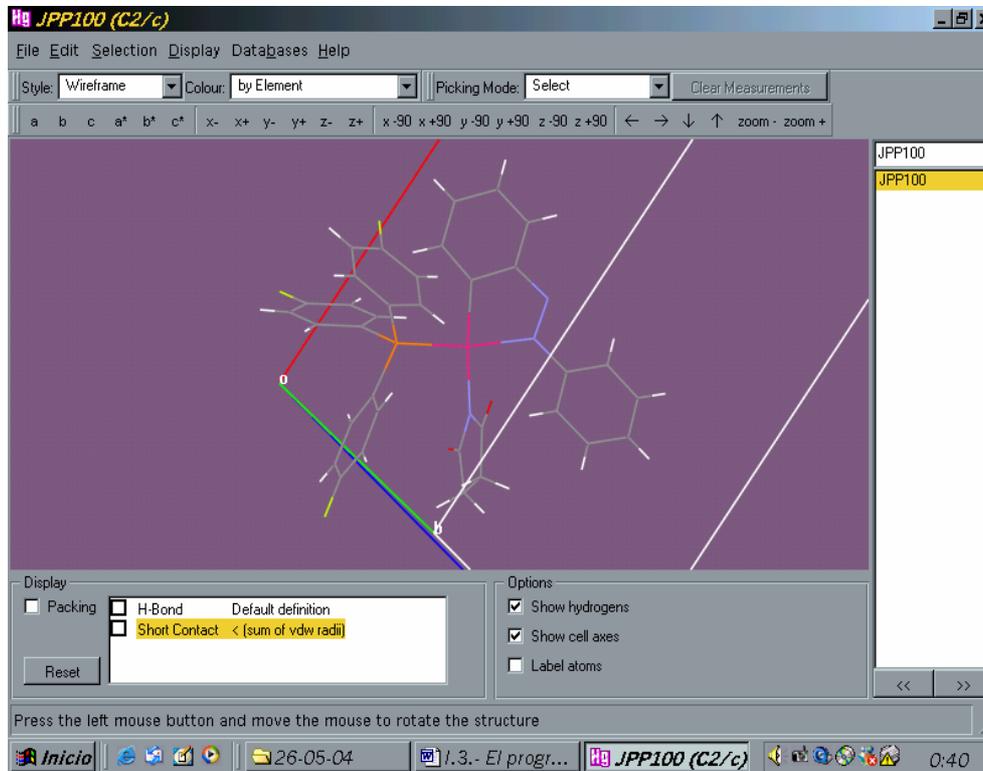


Figura 29

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

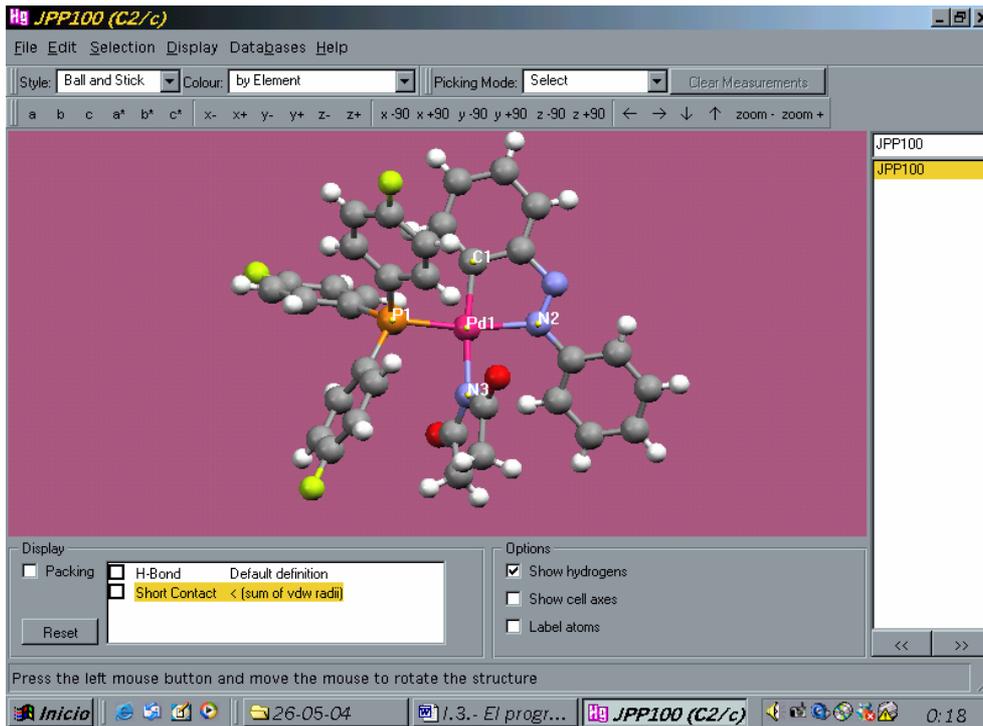


Figura 30

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

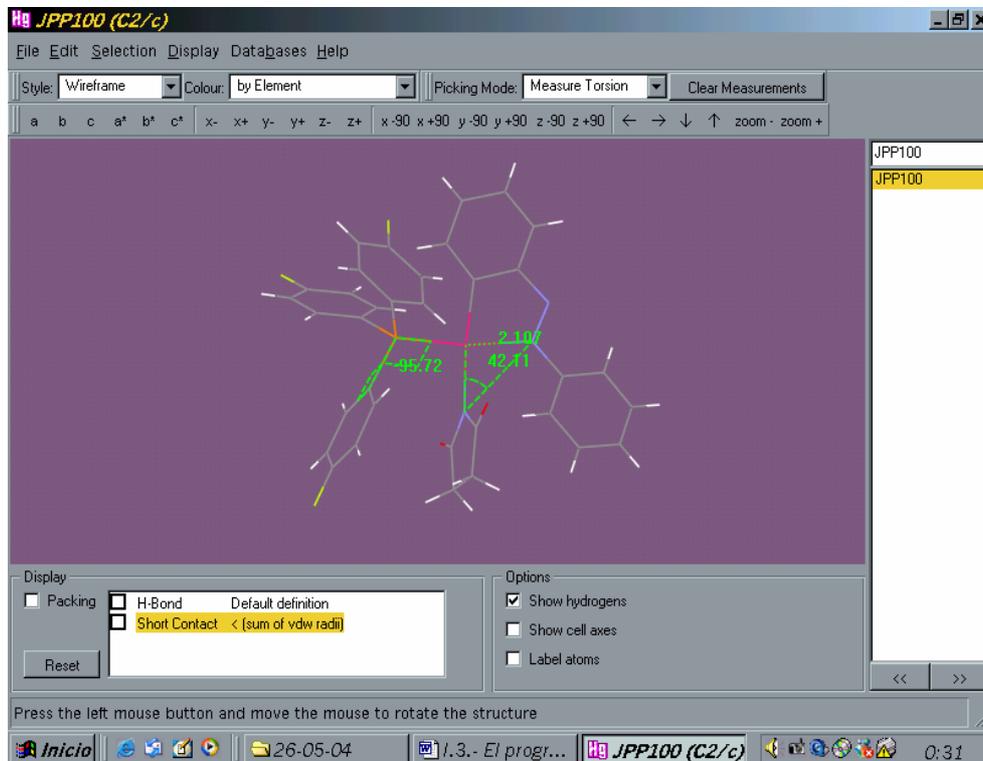


Figura 31

- 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.

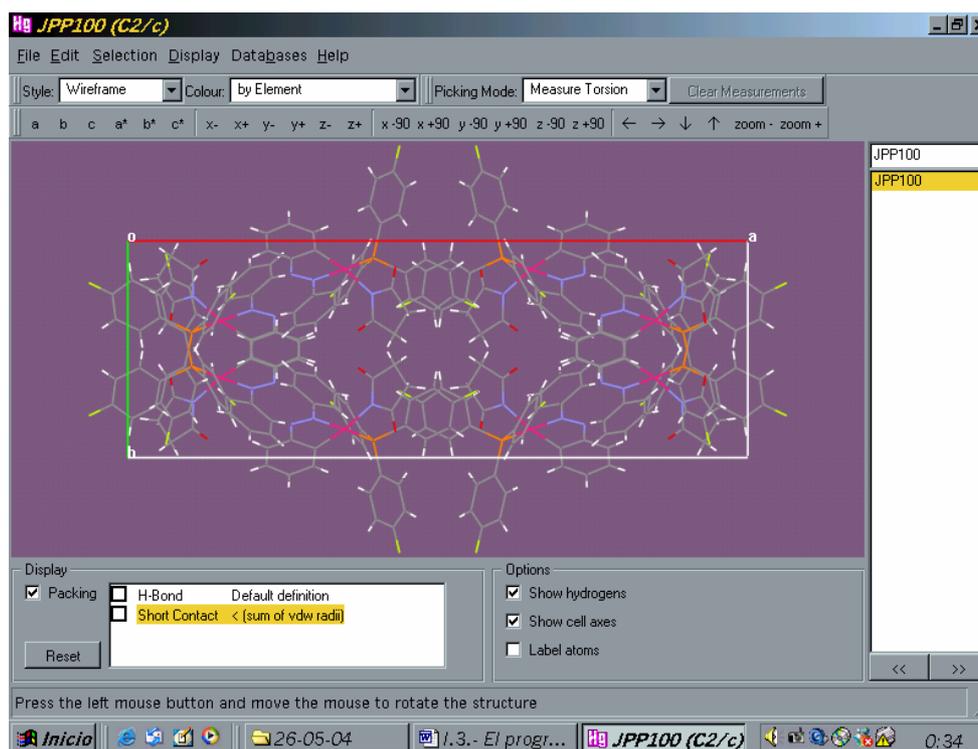


Figura 32

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

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

## II.1.2.- Programas específicos

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

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

#### Introducción

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

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

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

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

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

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

### El modelo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

donde  $f(\boldsymbol{\tau}, c)$  son las mismas mezclas de las leyes multivariante gaussianas

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

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

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

### El Método de Clasificación

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

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

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

La computación de estas probabilidades requiere la especificación de una distribución previa para  $(p_1, p_2, p_3, p_4, p_5, p_6)$  y para  $\sigma_c$ , la desviación estándar de las perturbaciones  $\varepsilon$ . En cuanto a las proporciones, se hace la elección  $p_c = 1/6$ , para  $c = 1, \dots, 6$ , lo cual indica que, *a priori*, no se favorece una conformación canónica particular. Para  $\sigma_c$ , si se elige  $\sigma_c = 6$ , a partir de la conocida propiedad de la ley de Gauss, el 95% de los valores tomados por las perturbaciones permanecerán entre  $-20^\circ$  y  $20^\circ$ , lo cual parece un rango razonable de valores.

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

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

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

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

Un método para asignar la conformación más probable a cada una de las distintas estructuras obtenidas en la base de datos consiste en comparar el valor de los 6 ángulos de torsión de cada una de ellas con las 50 combinaciones de los valores teóricos de las 6 conformaciones definidas para anillos de seis miembros (Tabla 4):

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

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

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

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

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

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

**Tabla 4.- Valores teóricos de ángulos de torsión para las conformaciones del ciclohexano**

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

desde

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

hasta

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

Sea por ejemplo la estructura de *refcode* NABDAW cuyos 6 ángulos de torsión son **-49.42, 48.17, -58.76, 61.69, -63.66 y 62.28**.

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

$$f(1) = [(60 - (-49.42))^2 + (-60 - 48.17)^2 + (60 - (-58.76))^2 + (-60 - 61.69)^2 + (60 - (-63.66))^2 + (-60 - 62.28)^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 288.}$$

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

$$f(50) = [(60 - (-49.42))^2 + (-40 - 48.17)^2 + (0 - (-58.76))^2 + (22 - 61.69)^2 + (0 - (-63.66))^2 + (-40 - 62.28)^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 197.}$$

El menor valor, 23, es el segundo, que corresponde a la configuración denominada C2. El segundo valor más bajo es 77 para las configuraciones HC2 y HC9, y así sucesivamente hasta los 50 casos posibles. Estos datos coinciden plenamente con los obtenidos mediante el Método de Clasificación (para  $\sigma = 10^\circ$ ) para la misma estructura, como se calculó anteriormente (*chair* 1.0000).

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

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

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

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

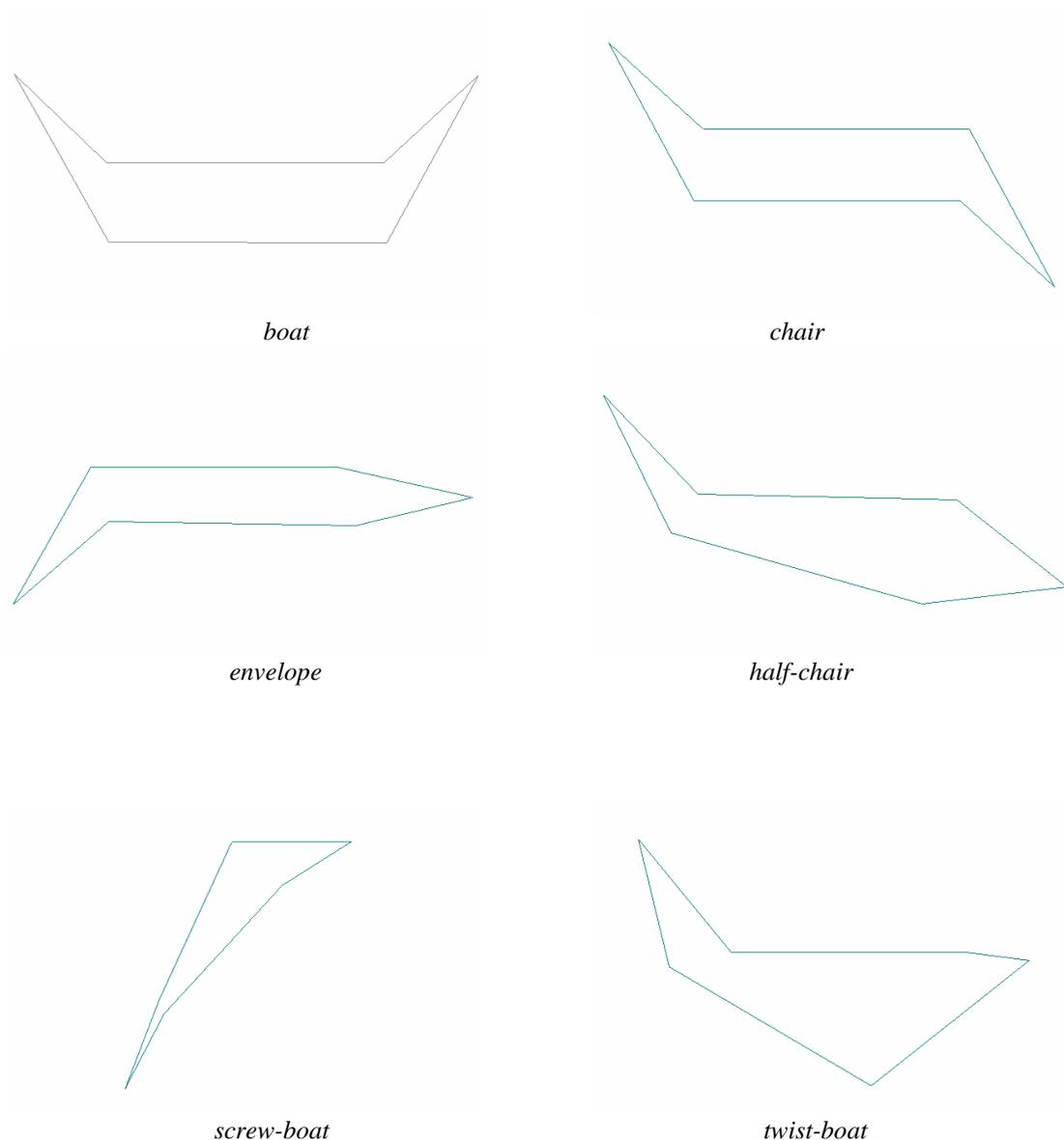
Por tanto, el valor de 23 obtenido para la conformación objeto de nuestro estudio se encuentra en el intervalo 12.25 → 24.48 correspondiente a una deformación comprendida entre 5 y 10° (10° aproximadamente). En definitiva, la conformación más probable la denominaremos “C2 deformada 10°”.

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

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

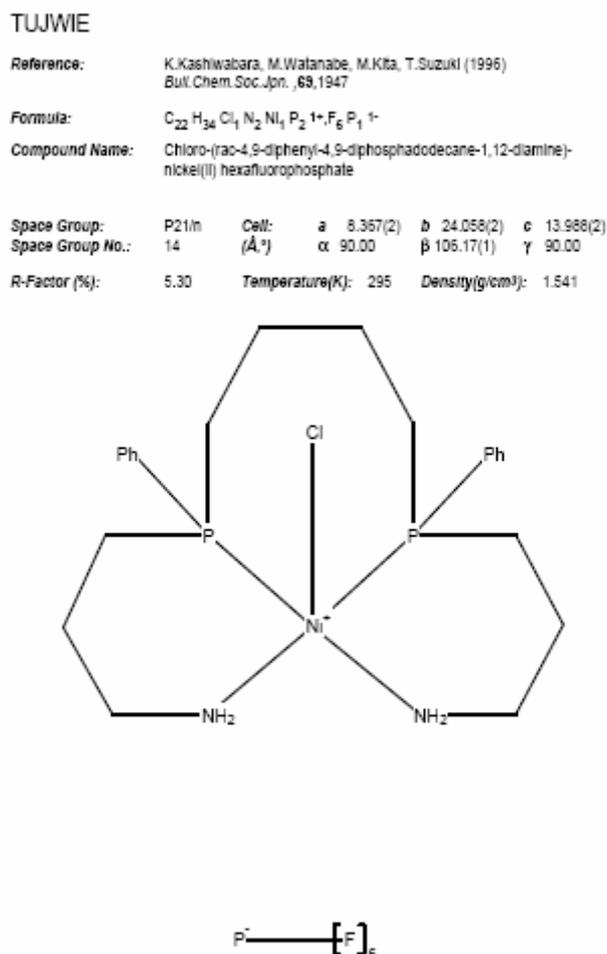
abrir desde *Hyperchem*. Por ello, se convirtieron a otro formato mediante la opción *save as* del menú *FILE* del propio *Hyperchem*. En nuestro caso se pasó a la extensión *pdb* con la finalidad de poder dibujar las figuras con el programa *Windows*.

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.



## II.2.- SELECCIÓN DE LAS ESTRUCTURAS

El programa *ConQuest* permite obtener los datos estructurales de cada uno de los compuestos seleccionados, presentándolos de la forma que se recoge en la Figura 33 para el compuesto de *refcode* **TUJWIE**.



**Figura 33.-** Presentación de datos para la estructura de *refcode* **TUJWIE**.

Los datos estructurales consisten en:

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

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

Compuestos Fragmentos		
níquel	paladio	platino
1300	114	97
2582	198	136
93	144	124
164	184	175
55	17	77
128	18	86
67	36	24
114	64	38
TOTAL		
1515	311	322
2988	464	435

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

## Bibliografía II

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

### III.- ESTUDIO CONFORMACIONAL DEL CICLOHEXANO Y DE LOS COMPUESTOS OBJETO DE ESTUDIO

#### III.1.- EL CICLOHEXANO

El ciclohexano,  $C_6H_{12}$ , es un anillo de seis miembros. Si su estructura fuera plana tendría un ángulo interno de  $120^\circ$ , inadecuado para la hibridación  $sp^3$  que presenta el carbono; además, todos los hidrógenos estarían eclipsados (Figura 3.1):

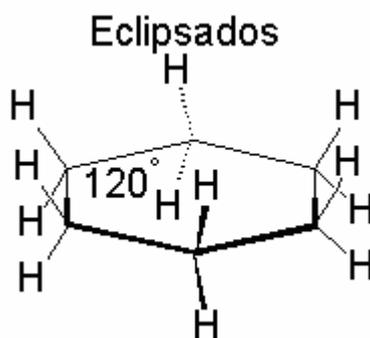


Figura 3.1

Su estructura es tridimensional y los ángulos internos presentan valores próximos a los ideales de la hibridación  $sp^3$  (Figura 3.2):

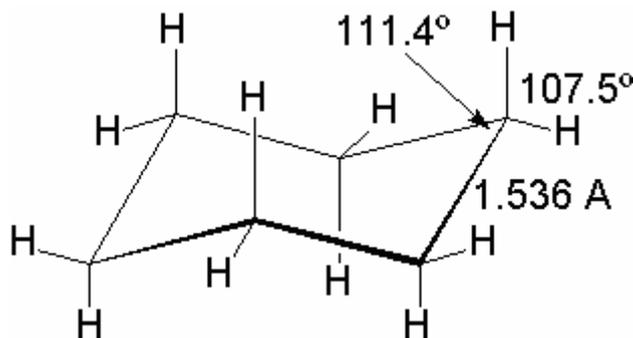
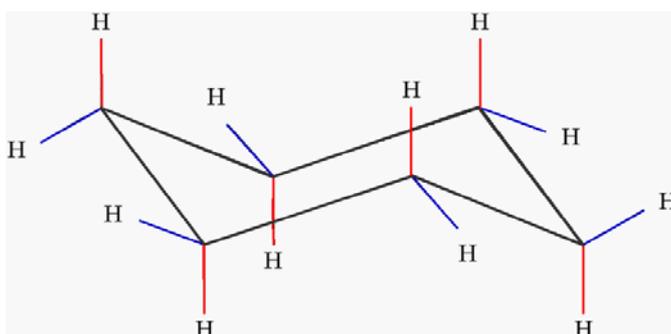


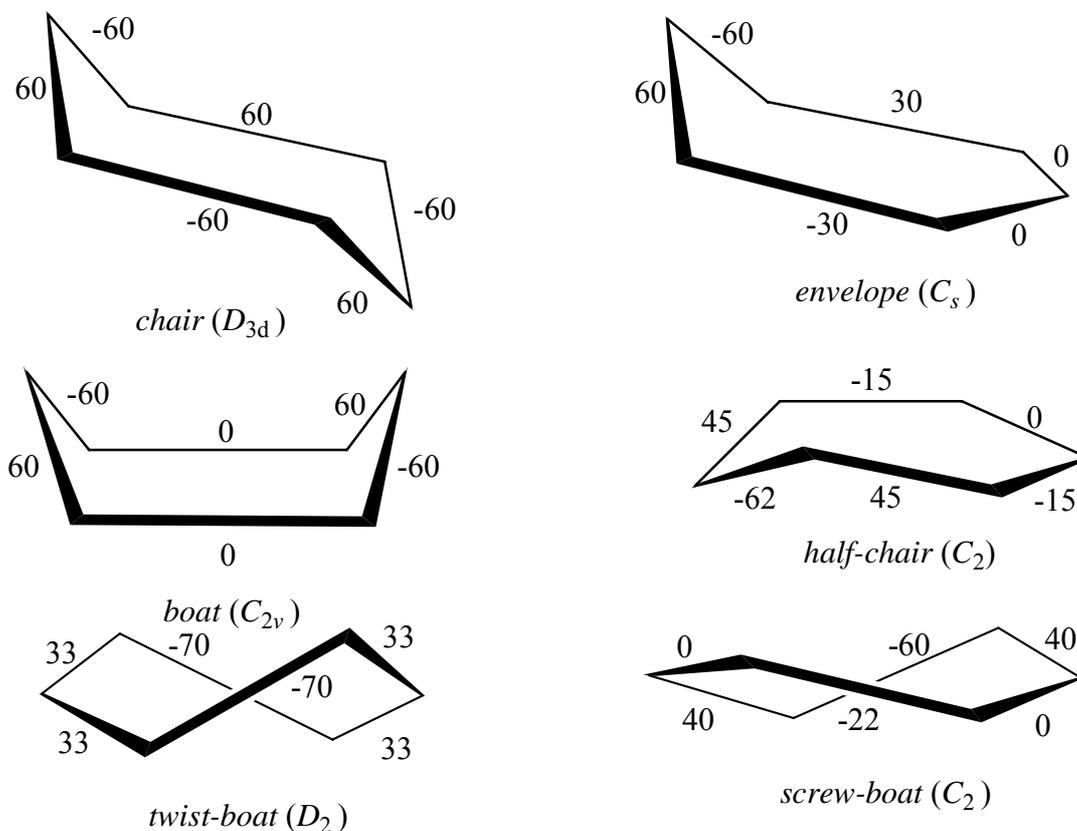
Figura 3.2

Para explicar la alternancia de las posiciones de los hidrógenos (axial y ecuatorial) utilizamos la conformación más estable: *chair* (silla). En la Figura 3.3, los hidrógenos axiales se representan con el enlace en color rojo y los ecuatoriales en azul:

Figura 3.3



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



En la Tabla 3.1 se resumen los datos anteriores:

Conformación ( $^{\circ}$ )	C	B	TB	E	HC	SB
$\tau_1$	60	0	33	30	45	40
$\tau_2$	-60	60	33	0	-15	0
$\tau_3$	60	-60	-70	0	0	-22
$\tau_4$	-60	0	33	-30	-15	0
$\tau_5$	60	60	33	60	45	40
$\tau_6$	-60	-60	-70	-60	-62	-60
Simetría	$D_{3d}$	$C_{2v}$	$D_2$	$C_s$	$C_2$	$C_2$

Tabla 3.1.- Ángulos de torsión, simetría y conformaciones del ciclohexano

Estas distintas conformaciones se deben a que el ciclohexano está constituido por enlaces sencillos (es posible la rotación de los mismos), lo que da lugar a un equilibrio conformacional en el que la silla se invierte. En la Figura 3.4 se recoge la barrera de energía de las distintas conformaciones en la ruta de inversión de la silla en la que los hidrógenos axiales se convierten en ecuatoriales y viceversa:

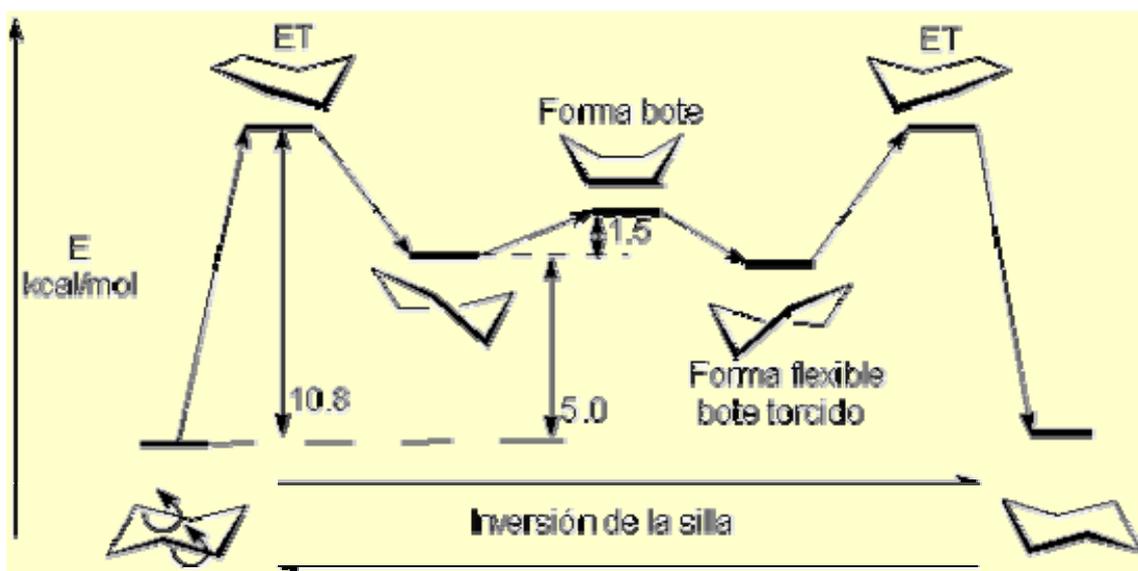


Figura 3.4

La inversión es especialmente relevante cuando el ciclohexano posee sustituyentes.

### III.1.1.- Rutas de interconversión en el ciclohexano

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

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

En el modo simétrico:

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

En la pseudorotación:

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

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

Las estructuras con un plano son máximos de energía.

Las estructuras con un eje son mínimos de energía.

En el ciclohexano, al igual que en el ciclooctano, se dan algunas de estas transformaciones para sus seis conformaciones. En la Figura 3.5 se recoge un esquema aclaratorio que las explica:

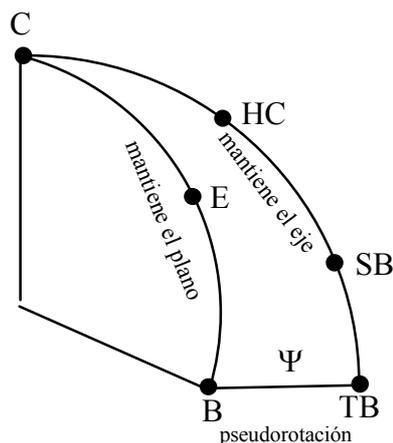
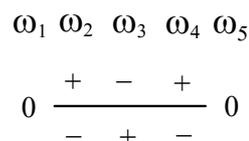
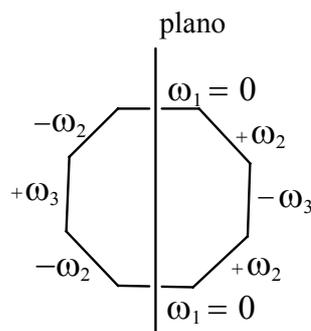
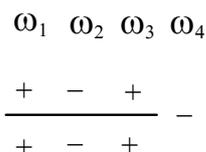
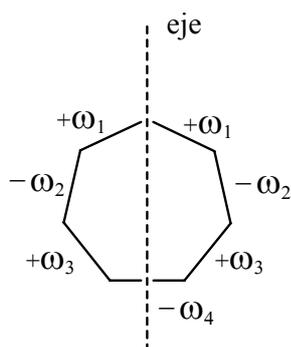


Figura 3.5.- Transformaciones de las conformaciones del ciclohexano

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

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

En esta convención cualquier anillo simétrico se describe mediante un símbolo constituido por una línea horizontal de simetría que representa al elemento de simetría (plano o eje) que pasa a través del anillo, y por la secuencia cíclica de signos de los ángulos diedros de los enlaces (+, 0, -) ordenados a su alrededor como en el anillo físico. Un átomo localizado sobre un plano o un eje se coloca arbitrariamente en la parte izquierda del símbolo. En las figuras siguientes se resumen ejemplos de símbolos y reglas para el uso de la convención:



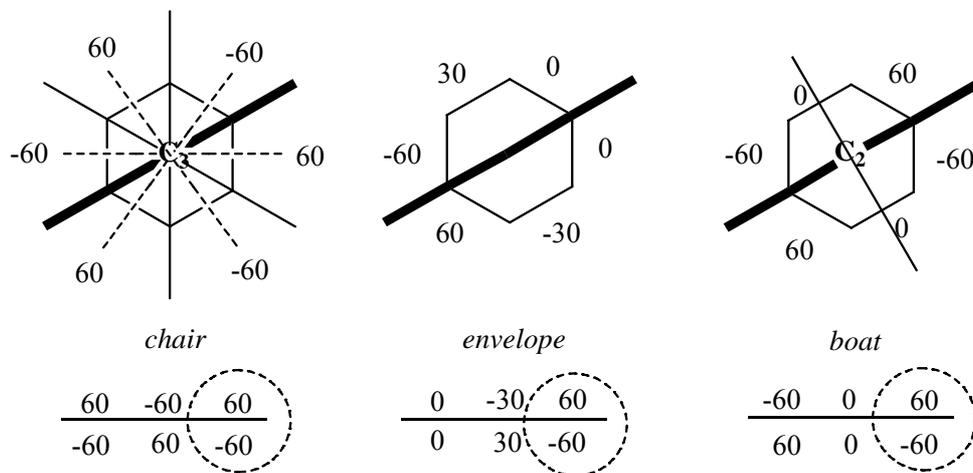
- 1.- Enlaces opuestos a través del correspondiente elemento de simetría tienen ángulos diedros ( $\omega_1$ ,  $\omega_2$ , etc) iguales en magnitud e igual signo a través de un eje, pero de signo opuesto si es a través de un plano.
- 2.- El símbolo es equivalente al del plano físico y puede girarse en uno u otro sentido sin cambiar su identidad.
- 3.- Cuando un elemento de simetría biseca un enlace, el signo de su ángulo diedro aparece en las proximidades del final de la línea de simetría; debe ser cero (p.e. eclipsado) si la simetría es un plano.
- 4.- La imagen especular de un anillo se genera cambiando todos los signos; así debe mostrarse que un anillo con un plano es idéntico a su enantiómero mientras que un anillo con sólo un eje no lo es.
- 5.- Símbolos con tres o más signos iguales consecutivos no son anillos reales o son anillos muy elevadamente tensionados; estos casos sólo se consideran ocasionalmente cuando hay barreras de transición.
- 6.- Para la presentación lineal el símbolo se puede truncar parcialmente eliminando los signos que hay debajo de la línea de simetría; en este caso hay que prefijar la letra A para eje (axis) o P para plano con el fin de indicar el elemento de simetría. Esto implica que los signos eliminados en la parte de debajo de la línea de simetría están relacionados con los de la parte de arriba mediante la regla 1. Los signos de la parte de arriba de las líneas se ponen entre paréntesis para distinguirlos de los que hay en los dos extremos, los cuales representan enlaces bisecados por el elemento de simetría. Así, los dos ejemplos de las figuras anteriores son, respectivamente, A (+ - +)- y P 0(+ - +)0.

Para nuestros datos, los casos más frecuentes serán:

$$\begin{array}{l} P \quad \frac{60 \quad -60 \quad 60}{-60 \quad 60 \quad -60} \qquad P \quad 0 \frac{60 \quad -60}{-60 \quad 60} 0 \\ \\ A \quad \frac{33 \quad -70 \quad 33}{33 \quad -70 \quad 33} \qquad A \quad -70 \frac{33 \quad 33}{33 \quad 33} -70 \end{array}$$

### Transformación

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



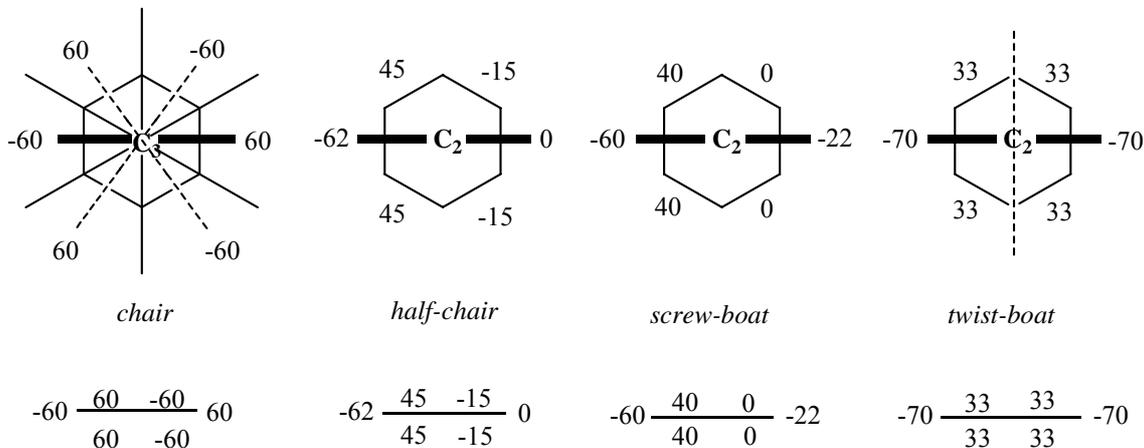
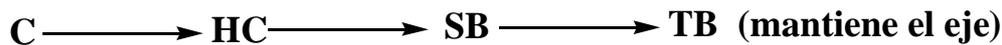
La secuencia es:

<b>C</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>
<b>E</b>	<b>30</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>-30</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>
<b>B</b>	<b>0</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>	<b>0</b>	<b>60</b>	<b>-60</b>

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

<b>C</b>	→	<b>E</b>	→	<b>B</b>
60	→	30	→	0
-60	→	0	→	60
60	→	0	→	-60
-60	→	-30	→	0

### Transformación

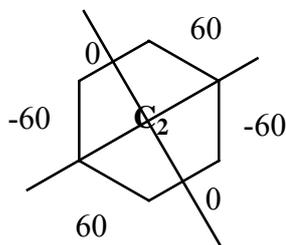


Observamos que mantiene el eje. Un ángulo de torsión varía de  $-60$  a  $-70$  y los otros cinco lo hacen paulatinamente:

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

### Transformación

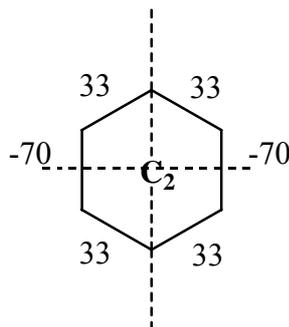
$\mathbf{B} \xrightarrow{\psi} \mathbf{TB}$  (pseudorrotación)



*boat*

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

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



*twist-boat*

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

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

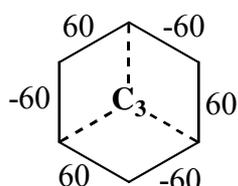
Mantiene el eje  $C_2$  (perpendicular al plano de la molécula) y los dos planos que presenta la conformación *boat* se convierten en dos ejes  $C_2$  en la *twist-boat*.

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

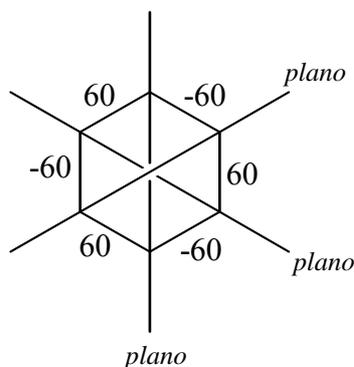
Observamos que mantiene, aproximadamente, dos valores, que sólo varían de  $-60$  a  $-70$  y los otros cuatro aumentan y disminuyen alternativamente:  $0 \rightarrow 33$ ;  $60 \rightarrow 33$ ;  $0 \rightarrow 33$  y  $60 \rightarrow 33$ .

III.1.2.- Simetría de las distintas conformaciones

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

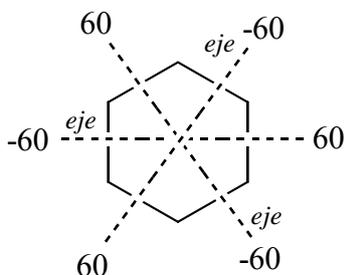


un eje  $C_3$  perpendicular al plano de la molécula



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

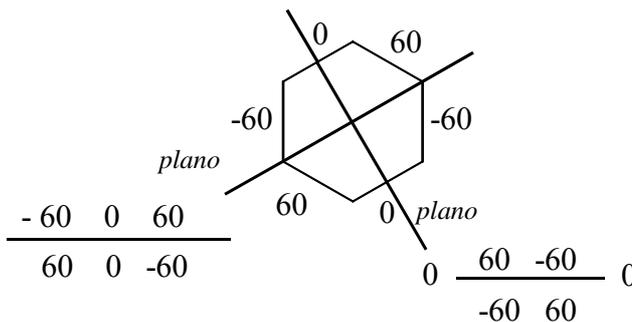
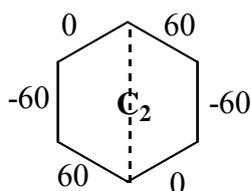
$$\begin{array}{ccc} 60 & -60 & 60 \\ \hline -60 & 60 & -60 \end{array}$$



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

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

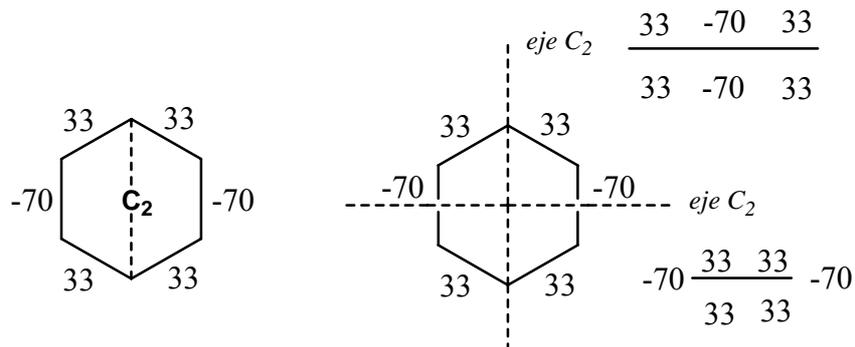
La conformación *boat* es  $C_{2v}$  porque tiene un eje  $C_2$  perpendicular al plano de la molécula y dos planos:



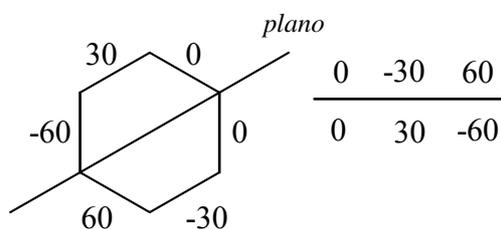
$$\begin{array}{ccc} -60 & 0 & 60 \\ \hline 60 & 0 & -60 \end{array}$$

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

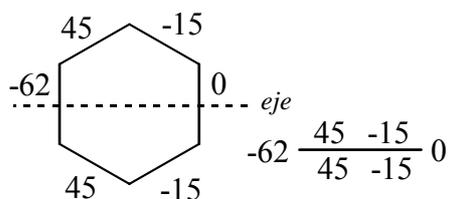
La conformación *twist-boat* es  $D_2$ , porque tiene un eje  $C_2$  perpendicular al plano de la molécula y dos ejes  $C_2$ :



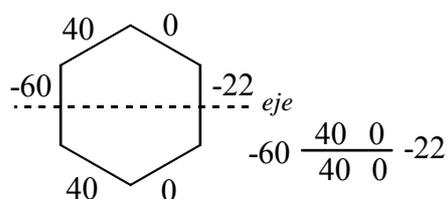
La conformación *envelope* es  $C_s$ , porque tiene un plano:



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



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



## III.2.- EXPANSIÓN DE CONFIGURACIONES CANÓNICAS DEL CICLOHEXANO.

### III.2.1.- Introducción

En el ciclohexano todos los átomos son iguales: carbono. Cabe la posibilidad de tener anillos de seis miembros con átomos distintos al carbono, incluso no ser carbono ninguno de ellos. Uno de los muchos sistemas químicos que presenta el ciclohexano es un heterociclo de metal (paladio y platino en nuestro caso) como el que se recoge en el esquema de la Figura 3.6 para las diaminas:

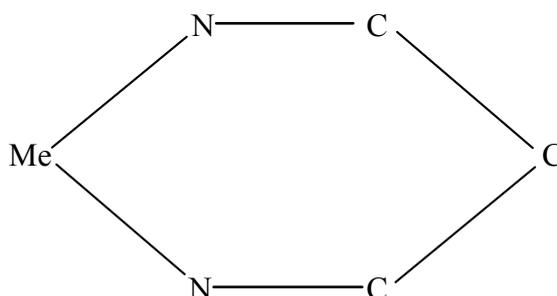
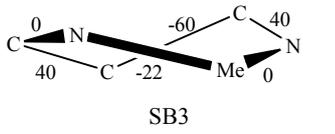
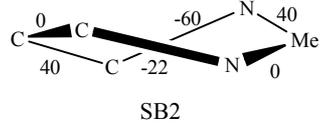
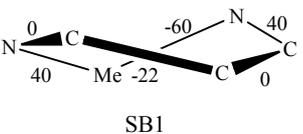
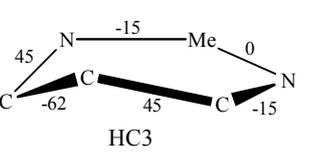
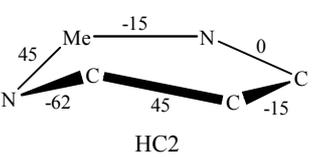
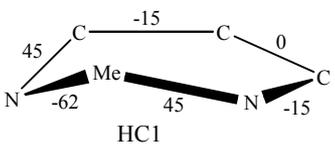
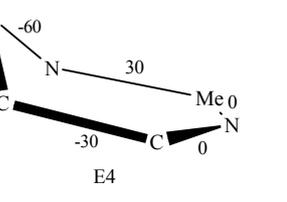
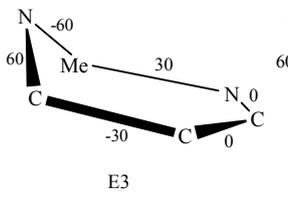
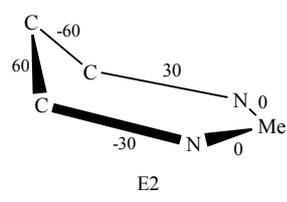
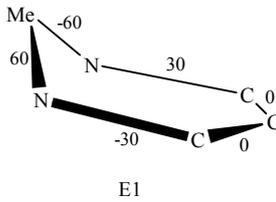
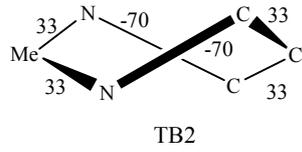
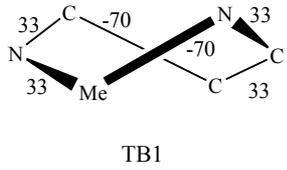
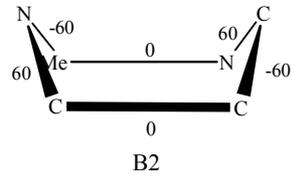
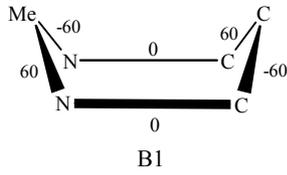
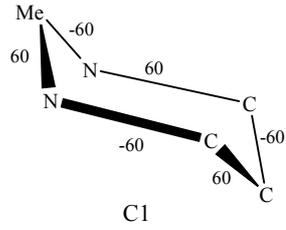
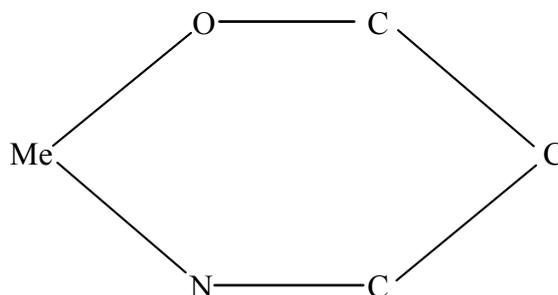


Figura 3.6.- diamina de metal

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



Otro de los sistemas químicos es el de un heterociclo de metal como el que se recoge en el esquema de la Figura 3.7:



**Figura 3.7.- quelato O,N de metal**

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

**III.2.2.- Cálculo teórico (matemático)**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$C \rightarrow 1$$

$$B \rightarrow 2$$

$$TB \rightarrow 2$$

$$E \rightarrow 4$$

$$HC \rightarrow 3$$

$$SB \rightarrow 3.$$

En total, 15 conformaciones.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$C \rightarrow 1$$

$$B \rightarrow 3$$

TB  $\rightarrow$  3

E  $\rightarrow$  6

HC  $\rightarrow$  6

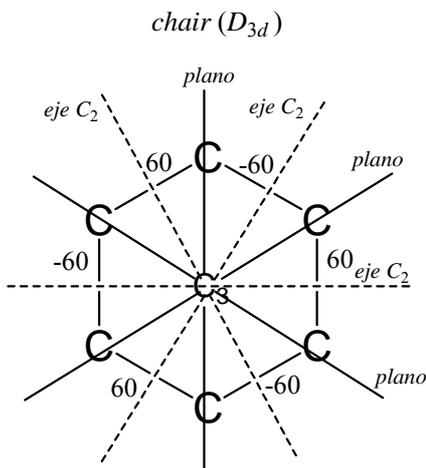
SB  $\rightarrow$  6.

En total, 25 conformaciones.

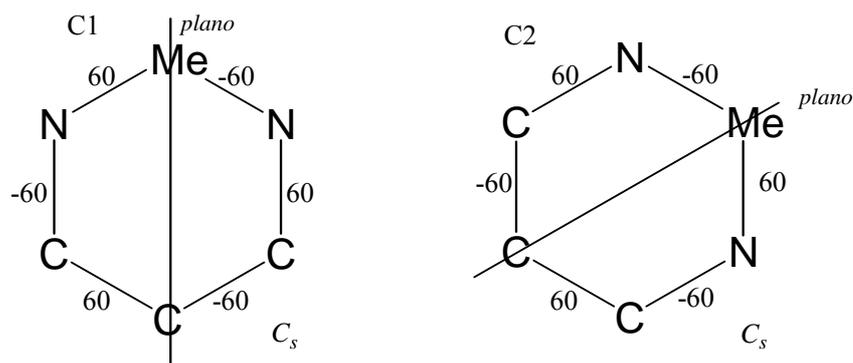
### III.2.3.- Cálculo teórico (conformacional)

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

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

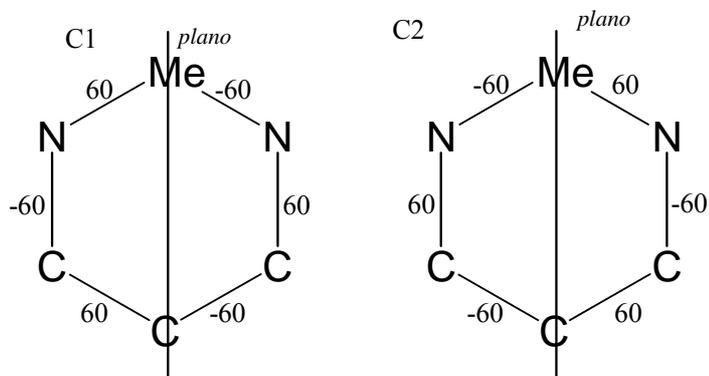


A continuación exponemos el *modus operandi*: mantener estos valores rotando la figura 60°. Nosotros lo haremos siempre con el átomo de metal, de manera que éste irá ocupando los diferentes vértices del hexágono. En este caso basta con recoger las dos primeras posiciones pues las demás son una mera repetición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



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

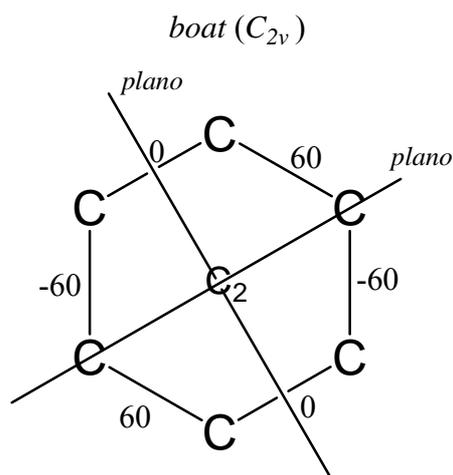
Ahora hay dos posibilidades: que ambas sean iguales o que sean distintas. Para comprobarlo utilizaremos los valores de los ángulos de torsión que rodean al átomo de metal. Por ello, colocaremos este átomo en la parte superior del hexágono, por lo que ahora son los valores de los ángulos de torsión los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



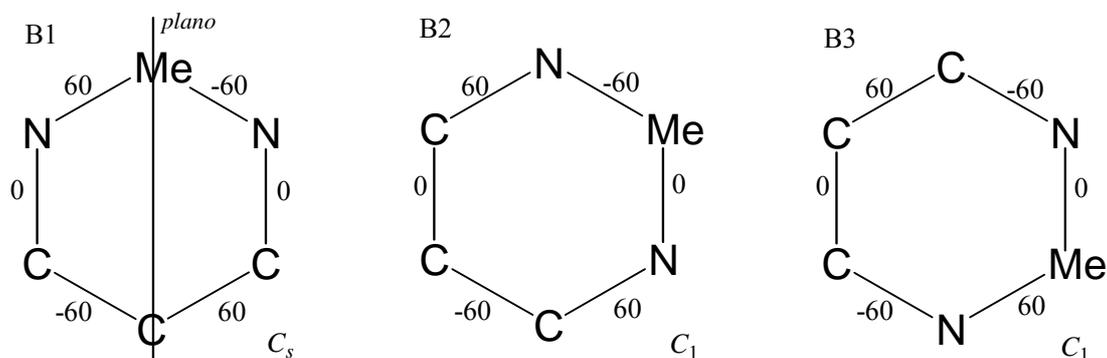
Se observa fácilmente que ambas conformaciones son iguales (una es la otra vista por detrás). Por tanto, como preveía el programa matemático sólo hay una conformación a la que denominaremos **C1**.

$$C1 = C2 \quad C1$$

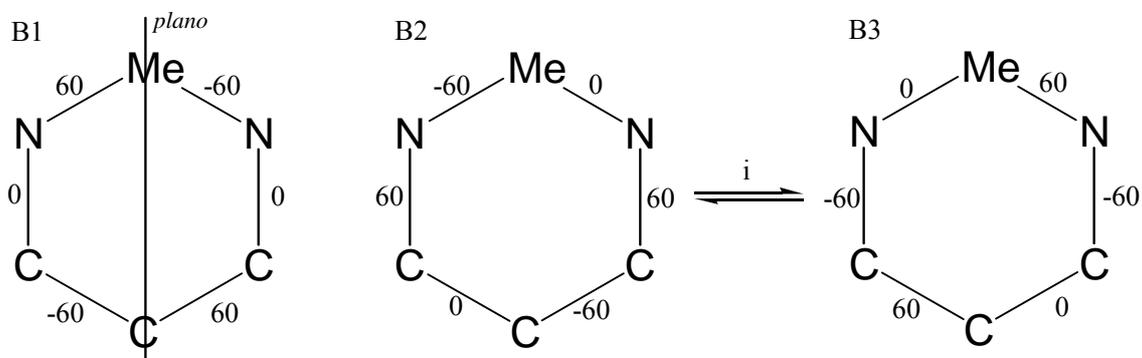
La segunda conformación que vamos a estudiar es la *boat*,  $C_{2v}$ , con una secuencia de ángulos de torsión 0, 60, -60, 0, 60, -60.



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

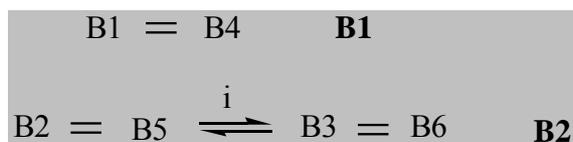


La conformación B1 es distinta a la B2 y B3 ya que presenta un plano que las otras dos no tienen. Para ver cómo son entre sí B2 y B3 recurrimos al método explicado anteriormente: colocar el átomo de cobalto en la parte superior del hexágono:



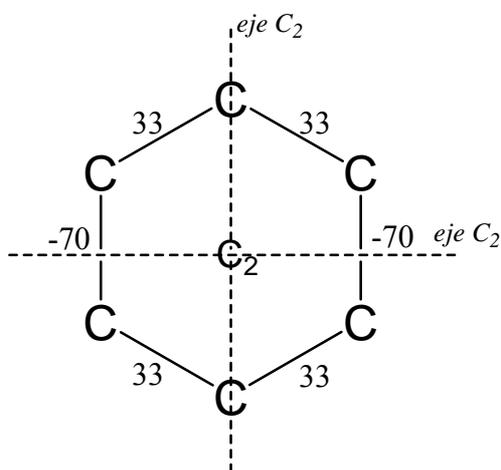
Se observa fácilmente que B3 es la imagen especular de B2.

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

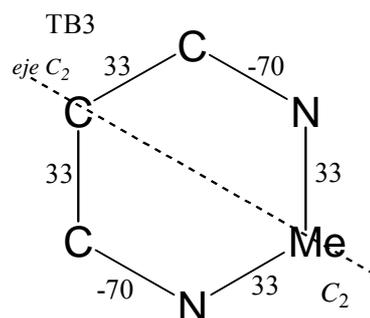
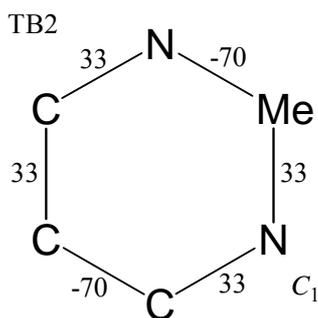
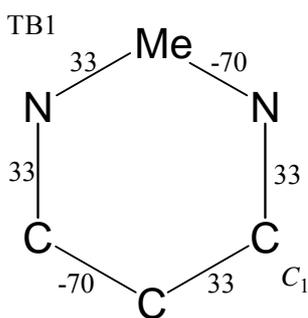


La conformación *twist-boat*,  $D_2$ , también tiene seis estructuras diferentes con ángulos de torsión 33, 33, -70, 33, 33, -70. El razonamiento es similar al anterior.

*twist-boat* ( $D_2$ )

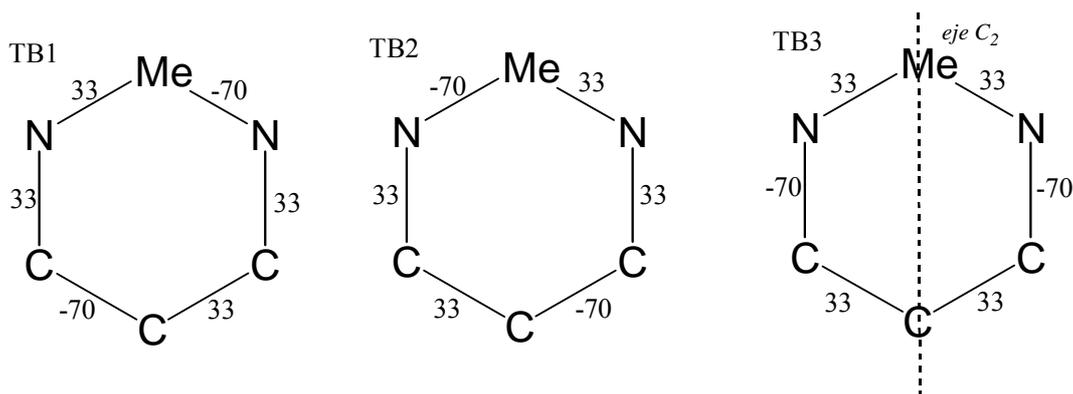


Las tres primeras conformaciones son:



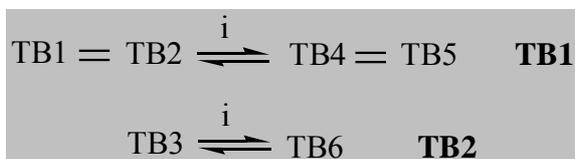
En este caso es la TB3 la que difiere de las otras dos.

Reordenando, tenemos:

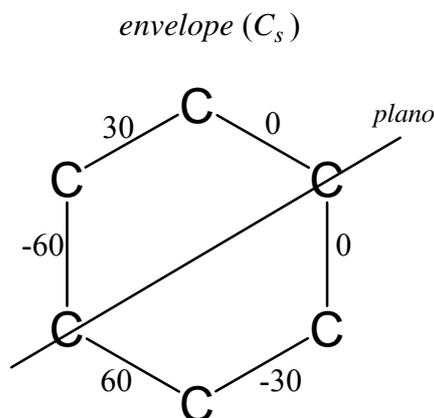


Se observa fácilmente que TB1 = TB2.

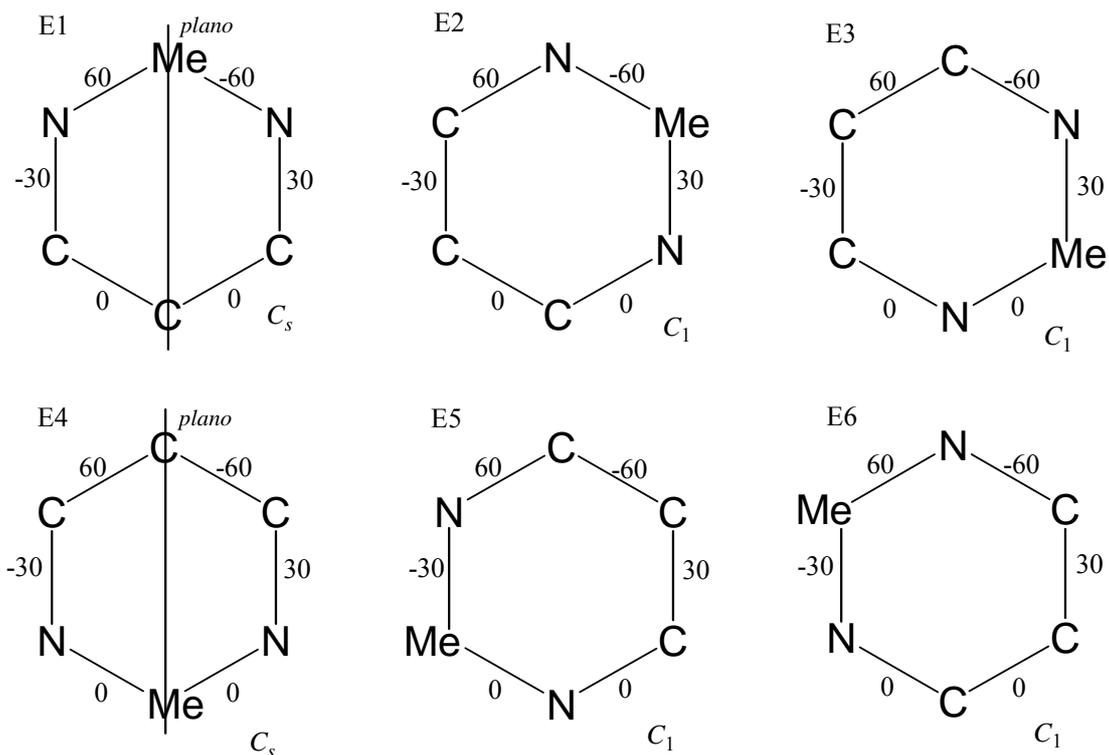
Como resumen, las conformaciones *twist-boat* guardan la siguiente relación:



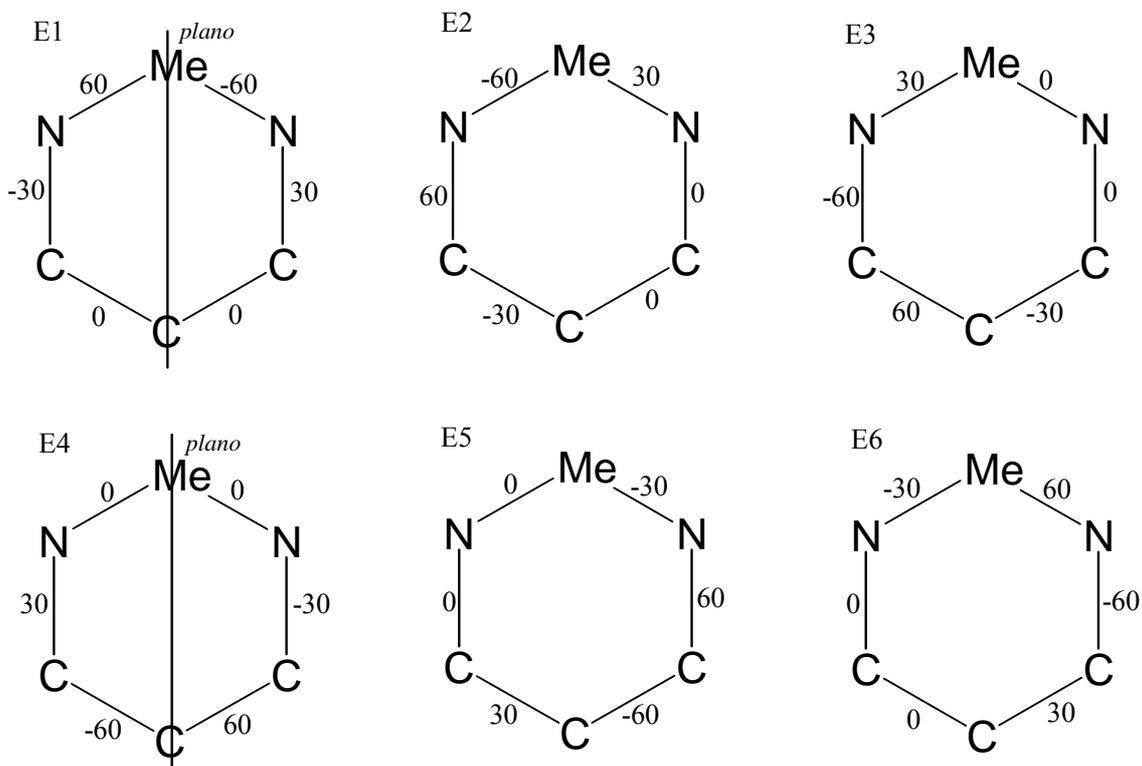
La conformación *envelope*,  $C_s$ , presenta doce conformaciones, seis con una secuencia en los ángulos de torsión de 30, 0, 0, -30, 60, -60 y otras seis con todos los signos cambiados.



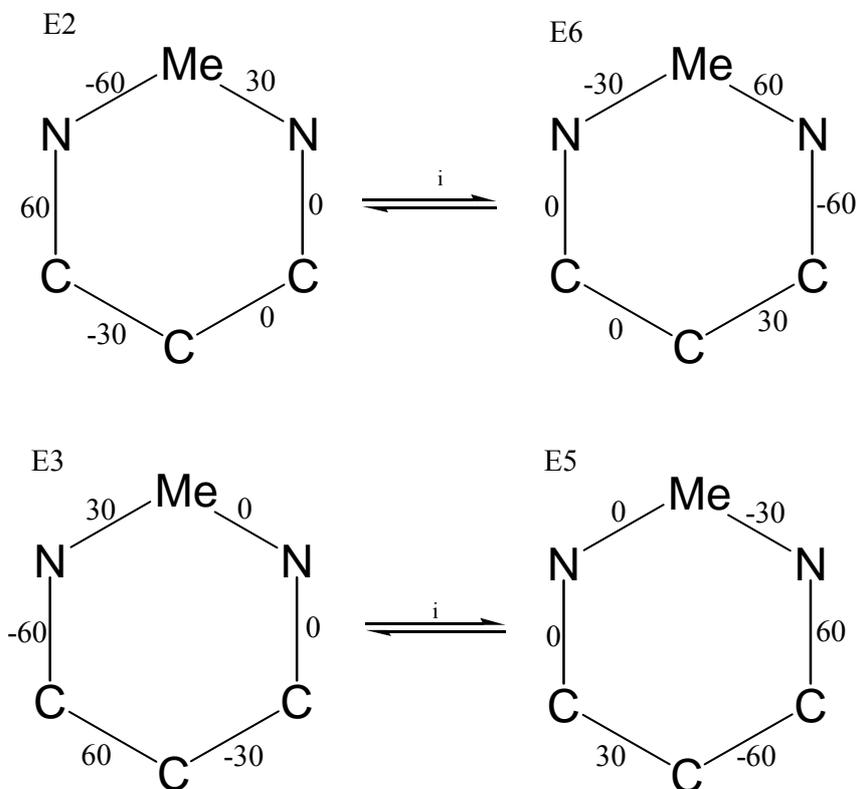
Ahora colocamos el átomo de metal en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión. Es obvio que se puede repetir para los otros seis casos.



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



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



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

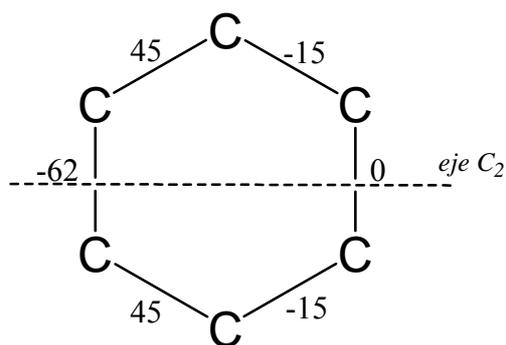
$$E1 = E7 \quad \mathbf{E1}$$

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

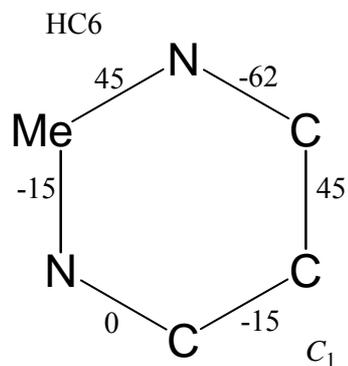
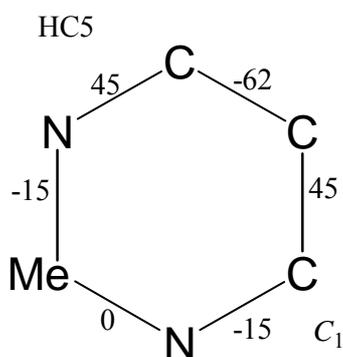
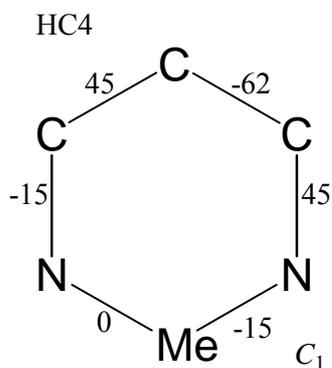
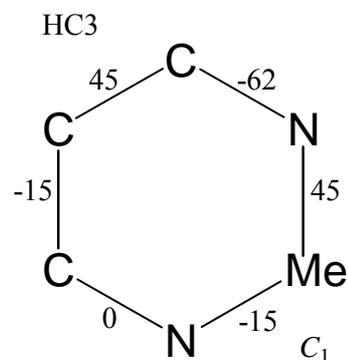
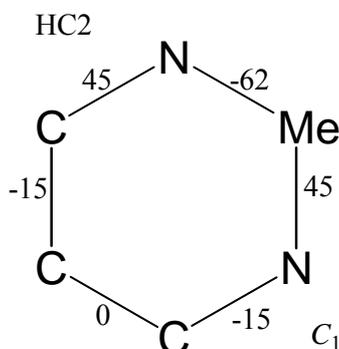
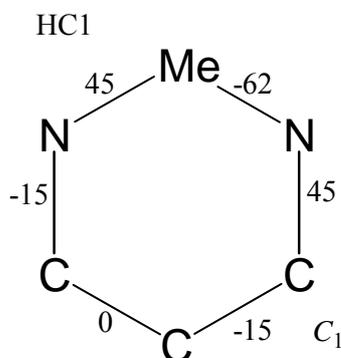


La conformación *half-chair*,  $C_2$ , presenta doce conformaciones, seis con una secuencia en los ángulos de torsión de 45, -15, 0, -15, 45, -62 y otras seis con todos los signos cambiados.

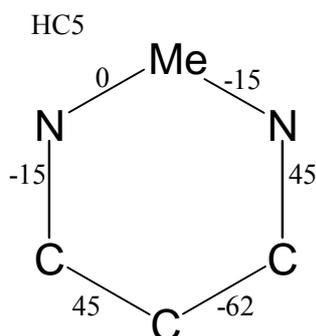
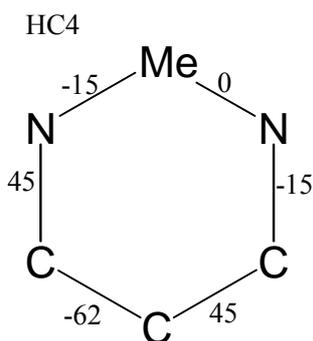
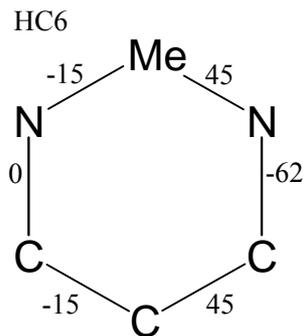
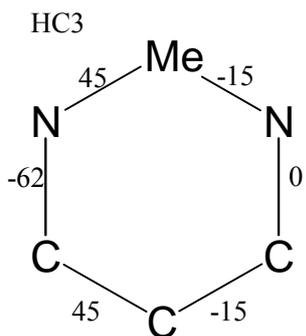
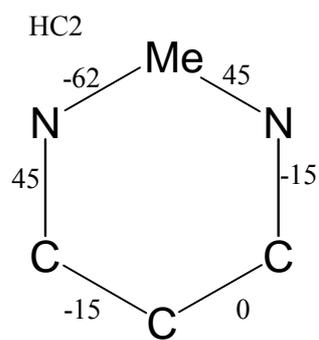
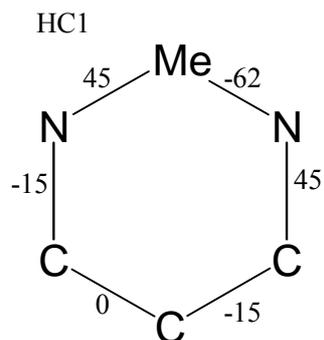
*half-chair* ( $C_2$ )



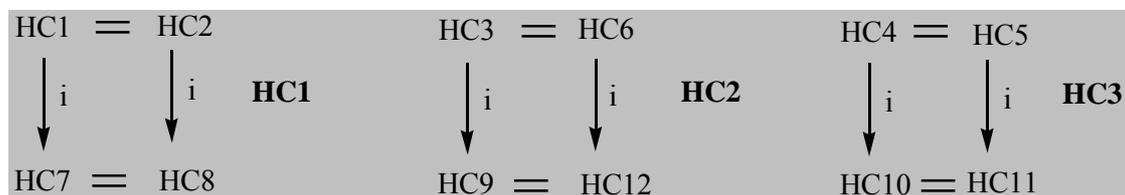
Ahora colocamos el átomo de metal en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión. Es obvio que se puede repetir para los otros seis casos.



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

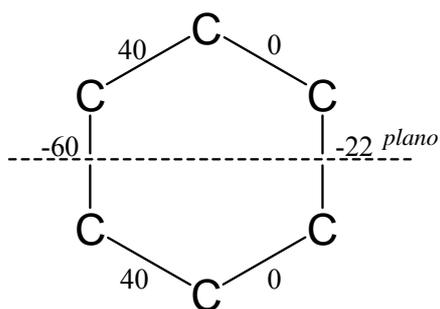


Como hemos señalado, podríamos repetir el proceso para las otras seis conformaciones (HC7 → HC12). El resultado global es

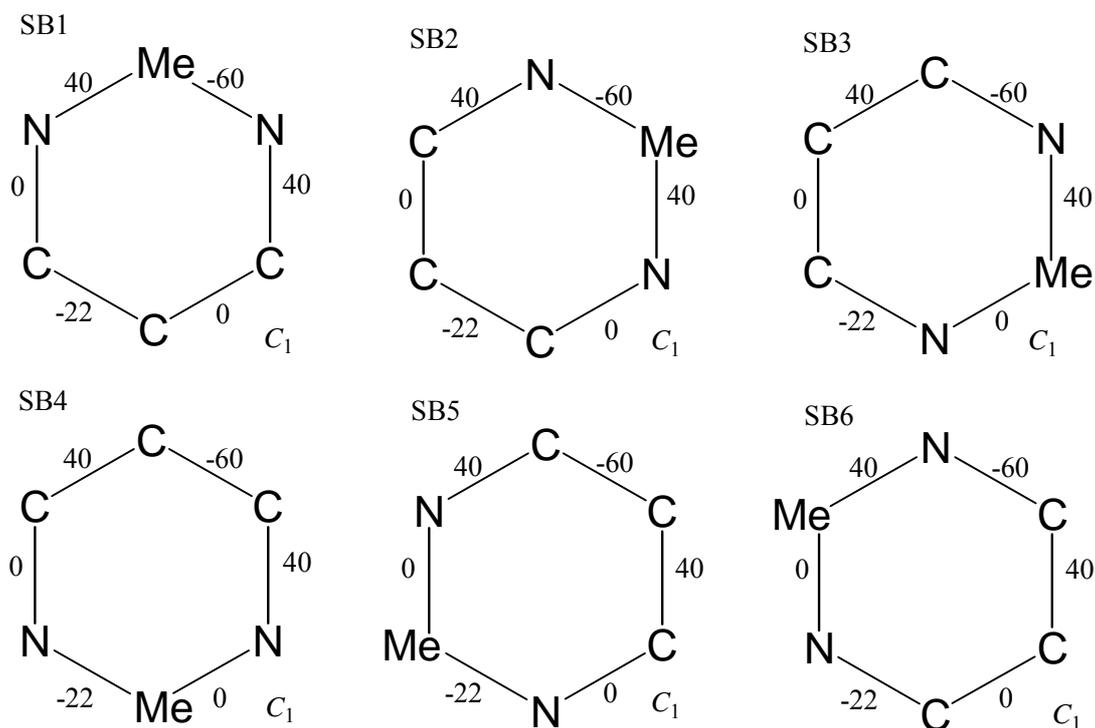


Finalmente, vamos a repetir el razonamiento para las doce conformaciones *screw-boat*,  $C_2$ , con una secuencia de ángulos de torsión para las seis primeras de valores de 40, 0, -22, 0, 40, -60.

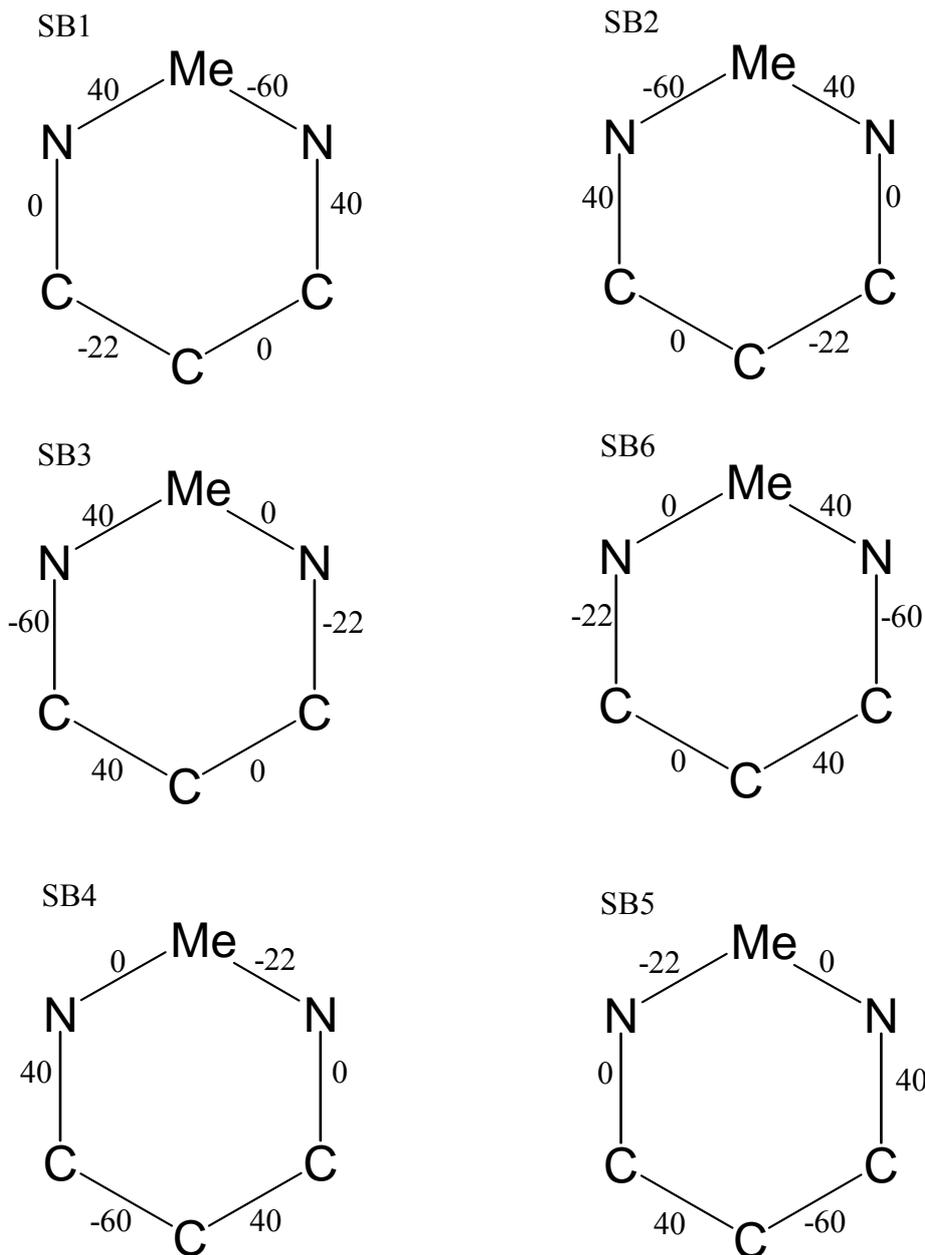
*screw-boat* ( $C_2$ )



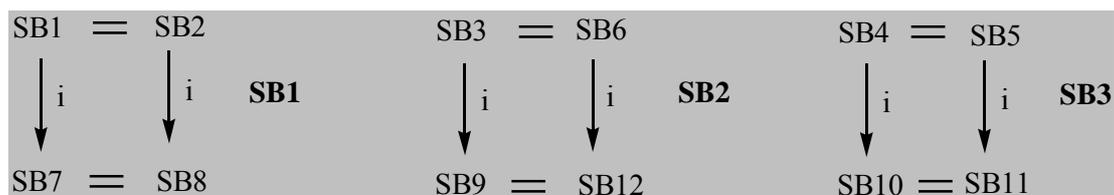
Colocamos el átomo de metal en las seis posiciones posibles para la primera secuencia de ángulos de torsión, obteniendo



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



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



Por tanto, hemos obtenido las siguientes conformaciones:

$$\mathbf{C1} \rightarrow 60, -60, 60, -60, 60, -60$$

$$\mathbf{B1} \rightarrow 0, 60, -60, 0, 60, -60$$

$$\mathbf{B2} \rightarrow 60, -60, 0, 60, -60, 0$$

$$\mathbf{TB1} \rightarrow 33, 33, -70, 33, 33, -70$$

$$\mathbf{TB2} \rightarrow -70, 33, 33, -70, 33, 33$$

$$\mathbf{E1} \rightarrow 30, 0, 0, -30, 60, -60$$

$$\mathbf{E2} \rightarrow -30, 60, -60, 30, 0, 0$$

$$\mathbf{E3} \rightarrow 0, 0, -30, 60, -60, 30$$

$$\mathbf{E4} \rightarrow 0, -30, 60, -60, 30, 0$$

$$\mathbf{HC1} \rightarrow 45, -15, 0, -15, 45, -62$$

$$\mathbf{HC2} \rightarrow 0, -15, 45, -62, 45, -15$$

$$\mathbf{HC3} \rightarrow -15, 45, -62, 45, -15, 0$$

$$\mathbf{SB1} \rightarrow 40, 0, -22, 0, 40, -60$$

$$\mathbf{SB2} \rightarrow -22, 0, 40, -60, 40, 0$$

$$\mathbf{SB3} \rightarrow 0, 40, -60, 40, 0, -22$$

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

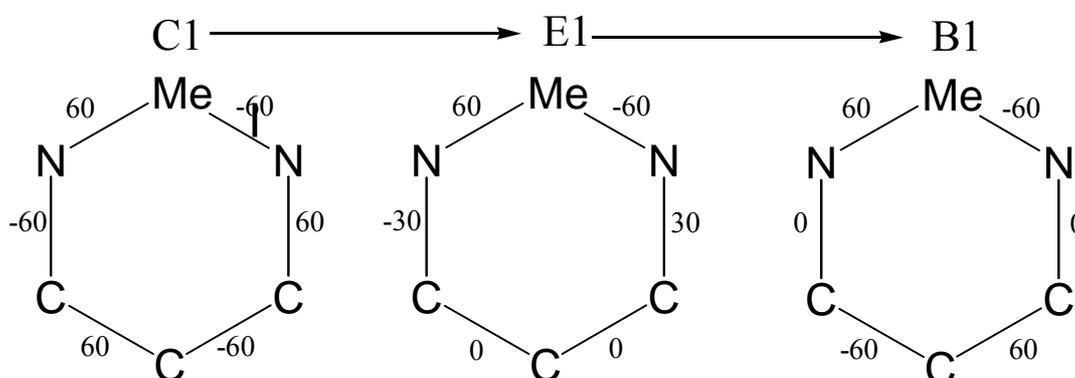
### III.2.4.- Rutas de interconversión en los compuestos seleccionados

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

#### Transformación



En este caso, las transformaciones posibles son:

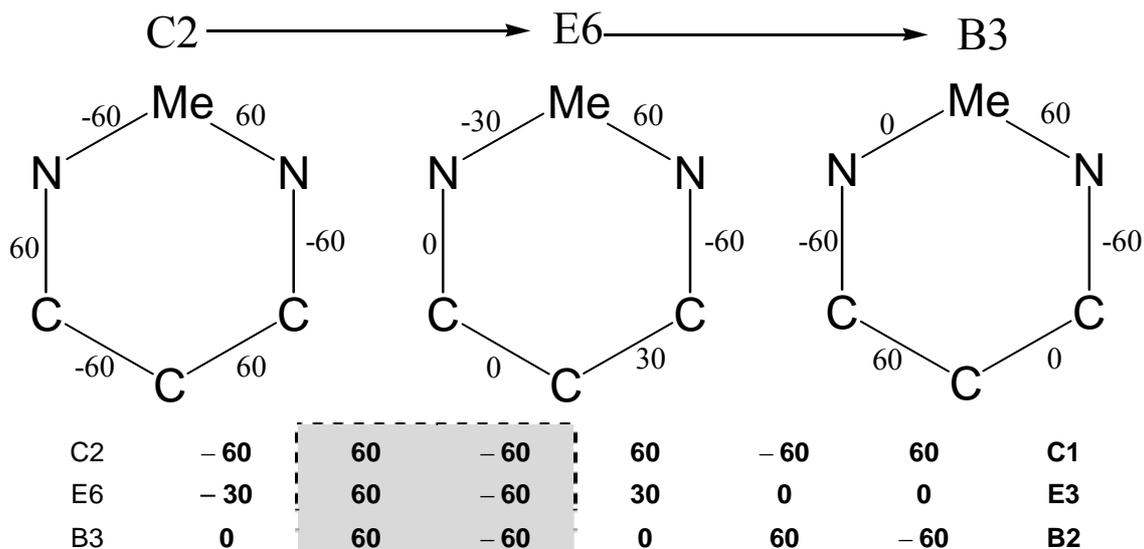


En ella, los ángulos de torsión que se mantienen, 60 y -60, están alrededor del átomo de cobalto (marcados con sombreado en la tabla siguiente) y los demás varían con la misma secuencia que en la transformación estudiada anteriormente.

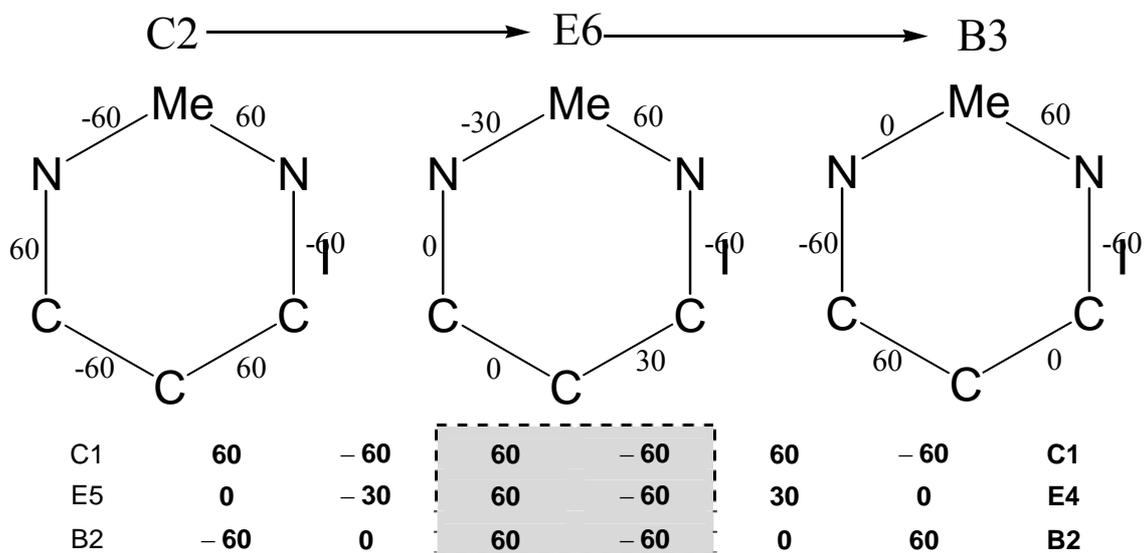
C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
E1	60	-60	30	0	0	-30	E1
B1	60	-60	0	60	-60	0	B1

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

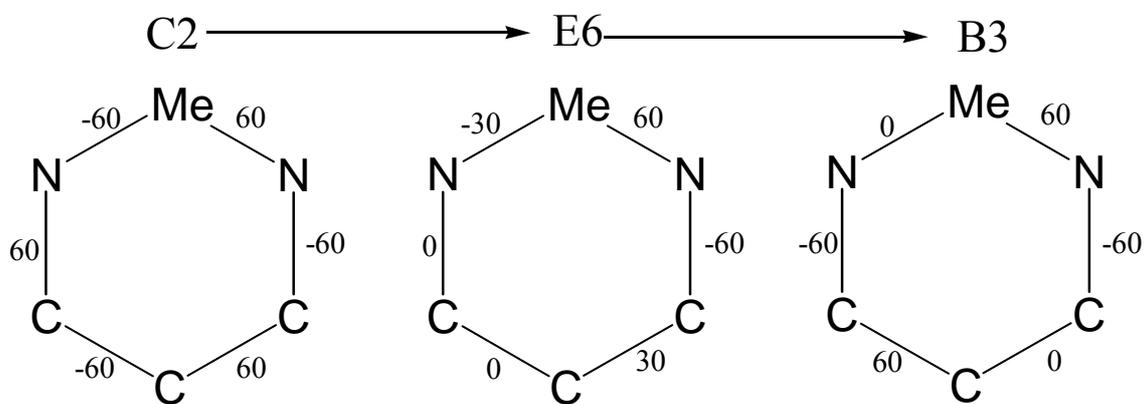
La siguiente transformación es:



Por tanto la transformación resultante es **C1→E3→B2**

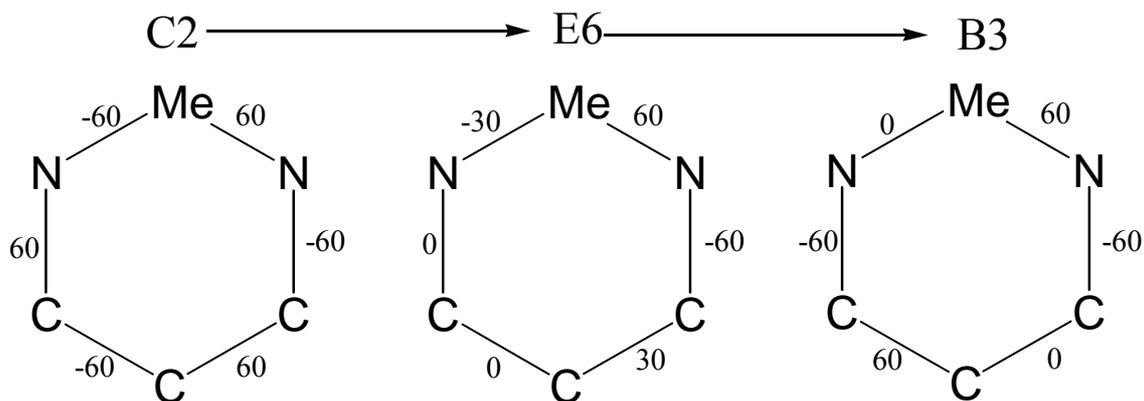


La transformación es **C1→E4→B2**



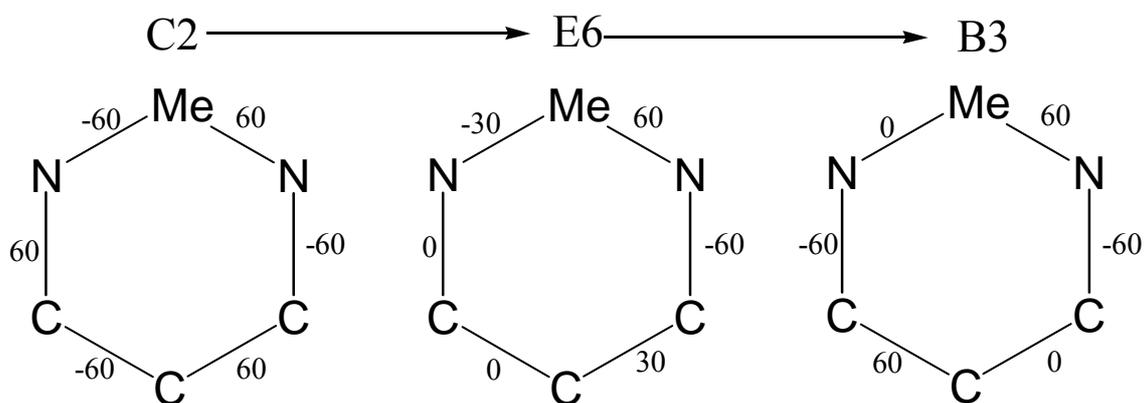
C2	-60	60	-60	60	-60	60	C1
E4	0	0	-30	60	-60	30	E2
B1	60	-60	0	60	-60	0	B1

La transformación es **C1→E2→B1**



C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
E3	30	0	0	-30	60	-60	E4
B3	0	60	-60	0	60	-60	B2

La transformación es **C1→E4→B2**



C2	-60	60	-60	60	-60	60	C1
E2	-60	30	0	0	-30	60	E3
B2	-60	0	60	-60	0	60	B2

La transformación es **C1→E3→B2**

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

**C1→E1→B1**

**C1→E3→B2**

**C1→E4→B2**

**C1→E2→B1**

**C1→E4→B2**

**C1→E3→B2**

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

**C1→E1→B1**

**C1→E2→B1**

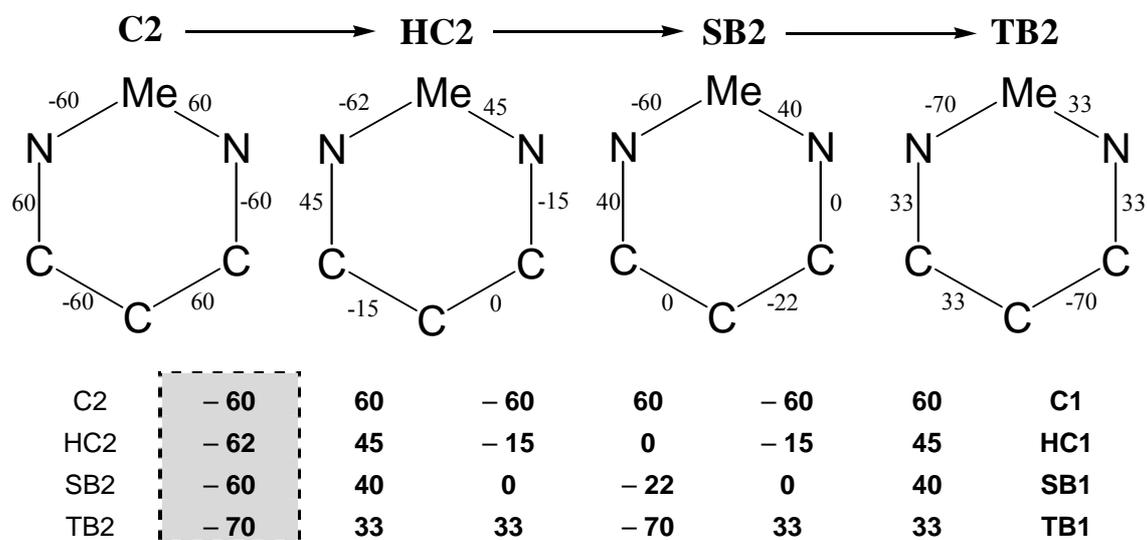
**C1→E3→B2**

**C1→E4→B2**

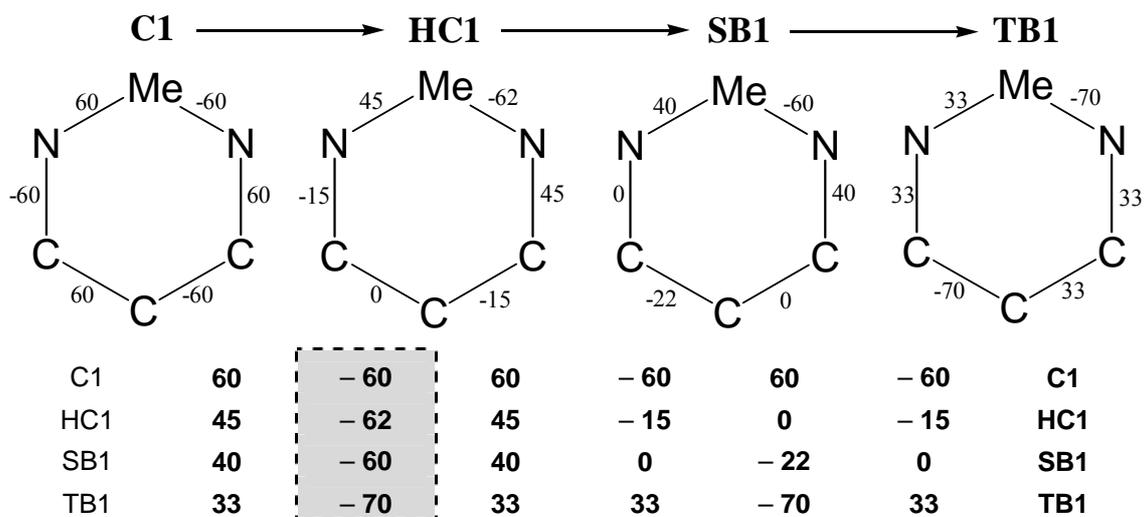
### Transformación



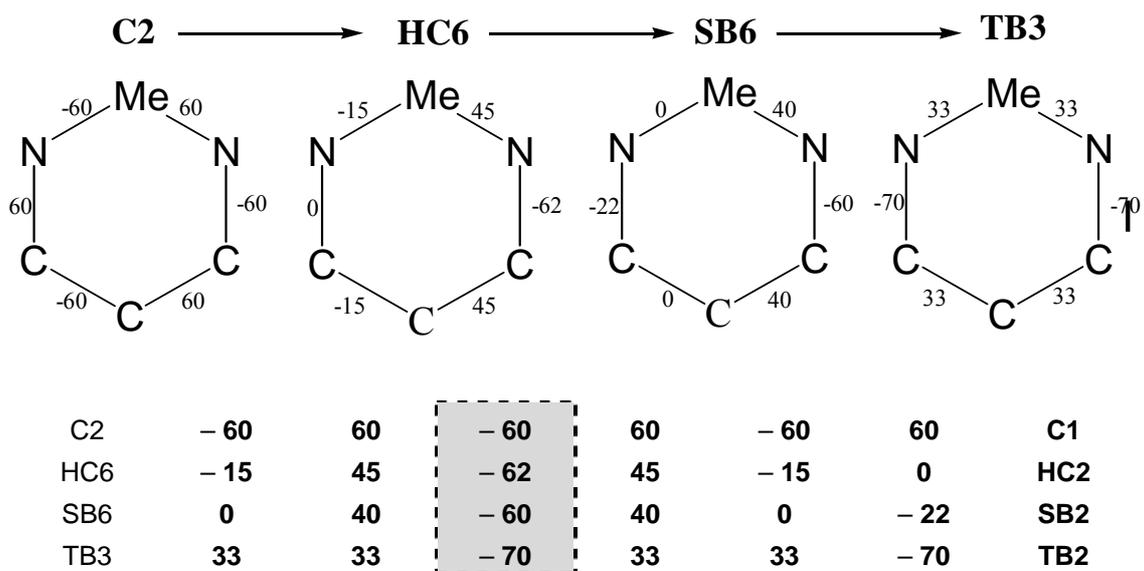
Tomamos ahora la ruta en la que se mantiene el eje, y obtenemos las siguientes transformaciones:



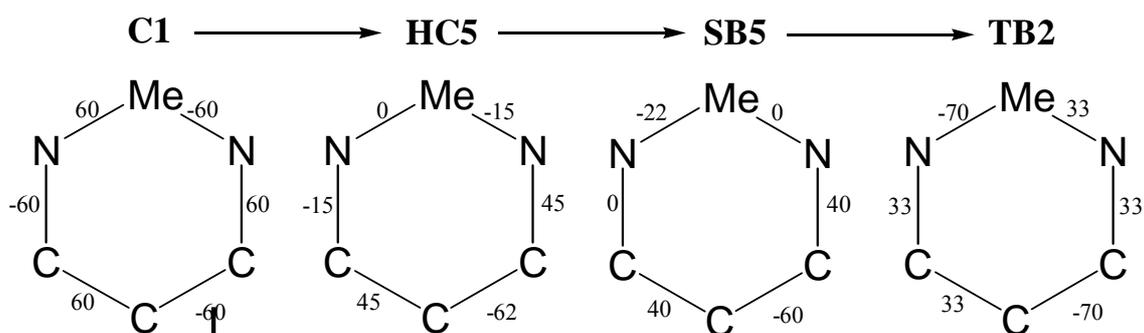
La transformación es  $C1 \rightarrow HC1 \rightarrow SB1 \rightarrow TB1$



La transformación es  $C1 \rightarrow HC1 \rightarrow SB1 \rightarrow TB1$

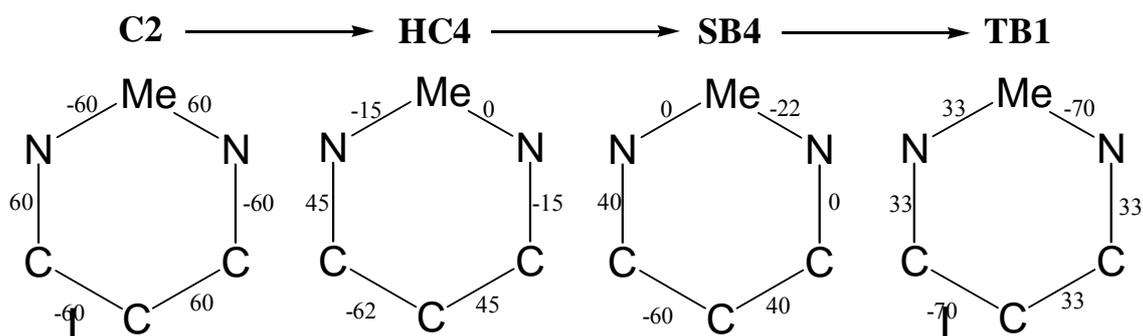


La transformación es  $C1 \rightarrow HC2 \rightarrow SB2 \rightarrow TB2$



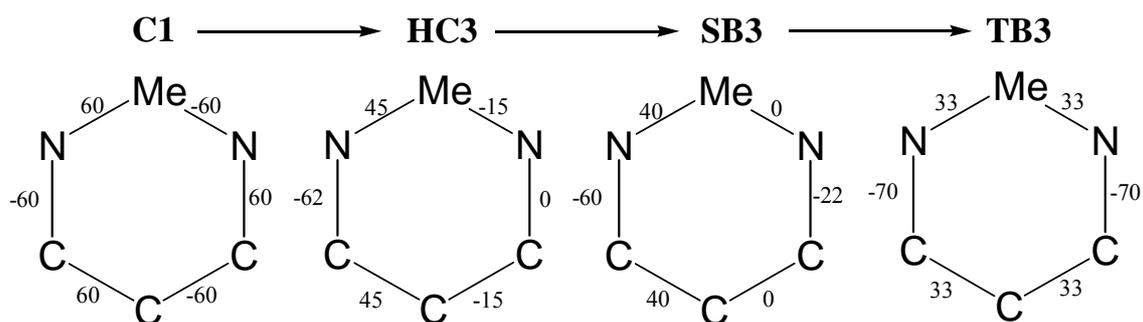
C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
HC5	0	-15	45	-62	45	-15	HC3
SB5	-22	0	40	-60	40	0	SB3
TB2	-70	33	33	-70	33	33	TB1

La transformación es **C1→HC3→SB3→TB1**



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

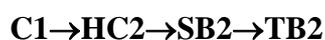
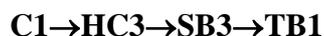
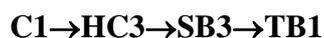
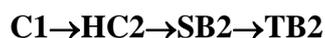
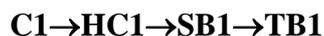
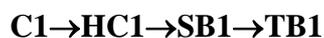
La transformación es **C1→HC3→SB3→TB1**



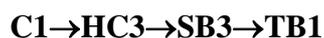
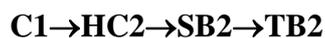
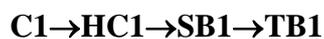
C1	60	-60	60	-60	60	-60	C1
HC3	45	-15	0	-15	45	-62	HC2
SB3	40	0	-22	0	40	-60	SB2
TB3	33	33	-70	33	33	-70	TB2

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

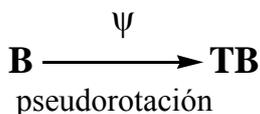
Acabado el proceso podemos comprobar que se recogen todas las rutas posibles, verificando que los ángulos de torsión que se mantienen van ocupando los distintos vértices del hexágono. El resultado obtenido, para las 15 conformaciones teóricas es:



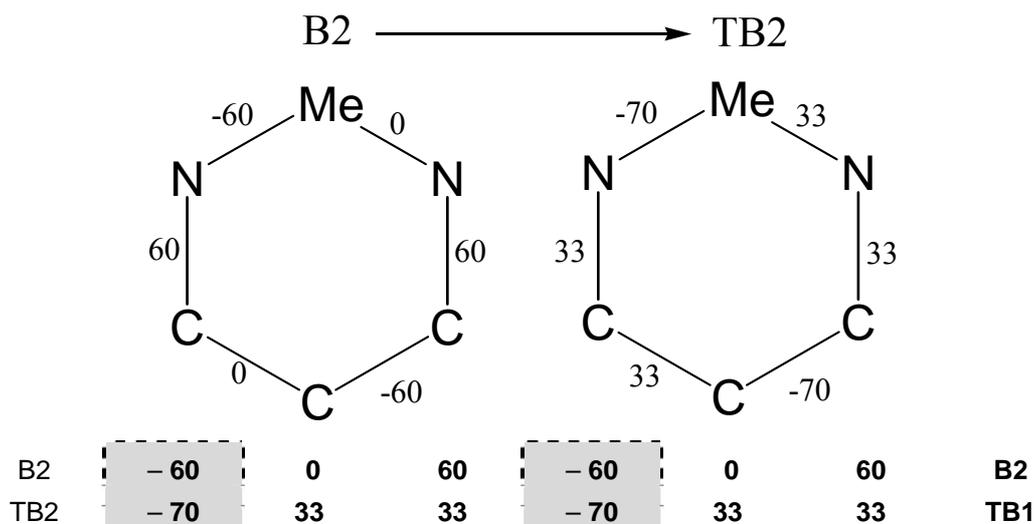
Observamos que hay repetidas tres rutas, por lo que el resultado definitivo es:



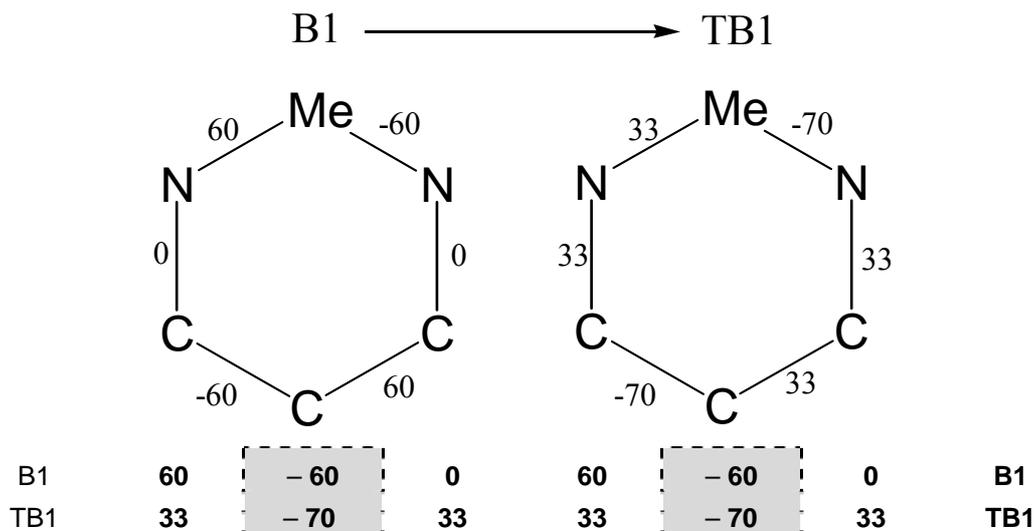
### Transformación



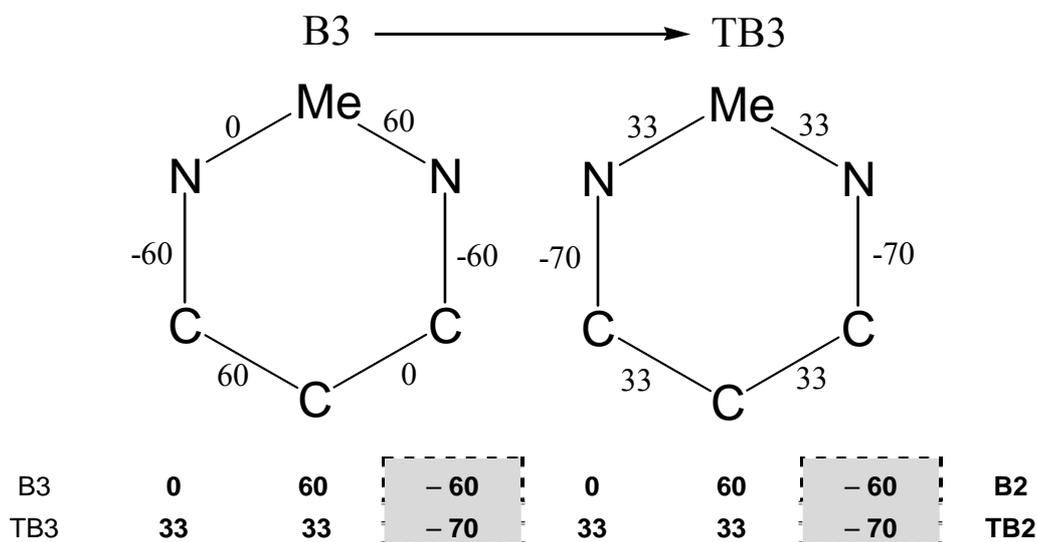
Las transformaciones posibles para este último caso, son las siguientes:



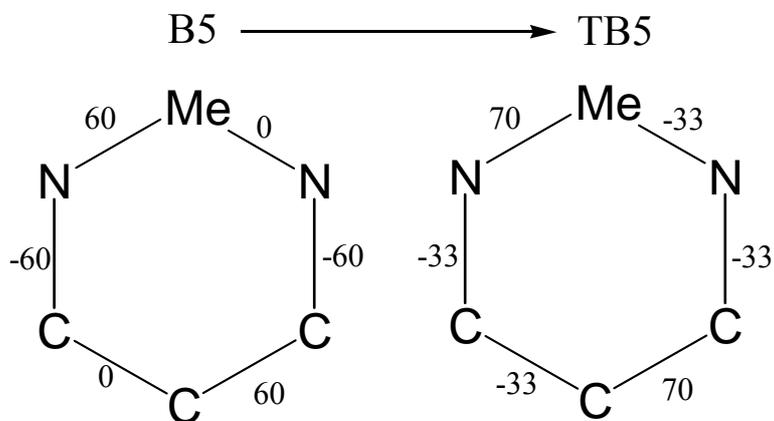
La transformación es **B2→TB1**



La transformación es **B1**→**TB1**

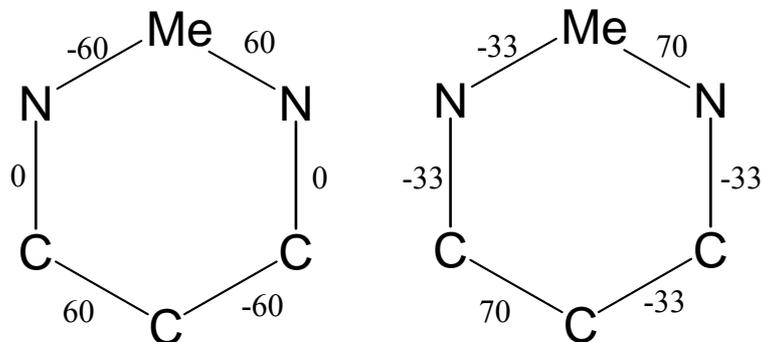
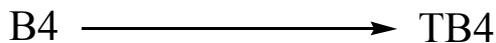


La transformación es **B2**→**TB2**



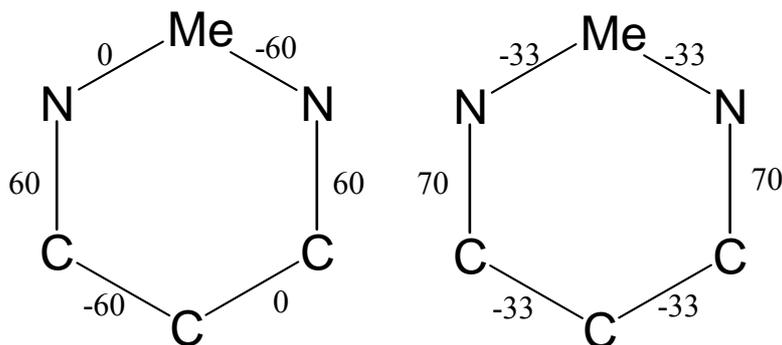
B5	<b>60</b>	0	-60	<b>60</b>	0	-60	<b>B2</b>
TB5	<b>70</b>	-33	-33	<b>70</b>	-33	-33	<b>TB1</b>

La transformación es **B2→TB1**



B4	-60	<b>60</b>	0	-60	<b>60</b>	0	<b>B1</b>
TB4	-33	<b>70</b>	-33	-33	<b>70</b>	-33	<b>TB1</b>

La transformación es **B1→TB1**



B6	0	-60	<b>60</b>	0	-60	<b>60</b>	<b>B2</b>
TB6	-33	-33	<b>70</b>	-33	-33	<b>70</b>	<b>TB2</b>

La transformación es **B2→TB2**

El resultado obtenido, para las 15 conformaciones teóricas es:

**B1→TB1**

**B2→TB1**

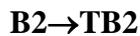
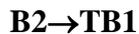
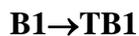
**B2→TB2**

**B2→TB1**

**B1→TB1**

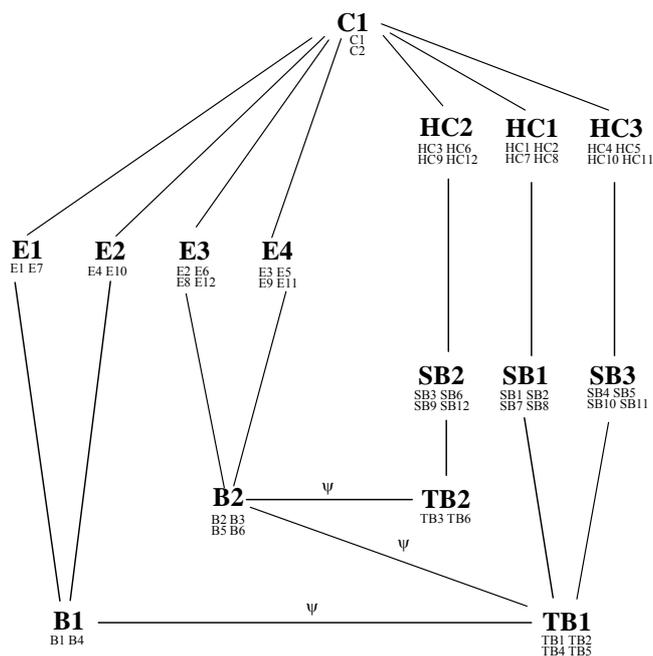
**B2→TB2**

En este caso, el resultado definitivo es:



### III.2.5.- Esquema de interconversión en las diaminas de cobalto

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



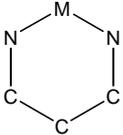
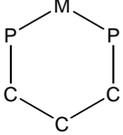
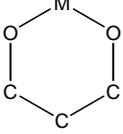
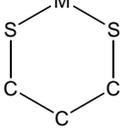
### Bibliografía III

Allen, F.H. and Taylor, R. *Acta Cryst.* **B 47**, 1991, 404-412.  
 Hendrickson, J.B. *J. Am. Chem. Soc.*, **89**, 1967, 7036-7043.

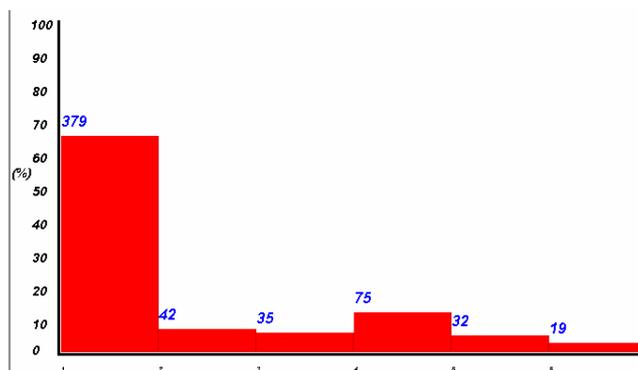
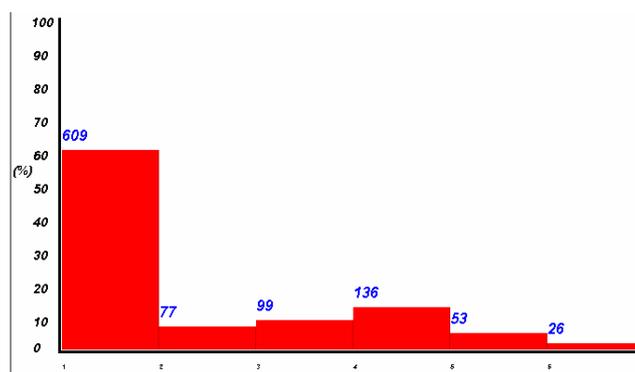
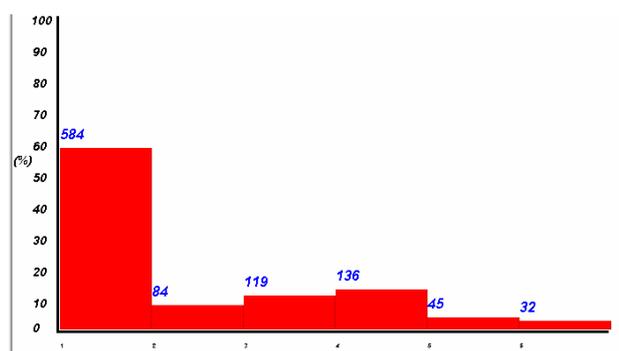
## IV.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

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

El resultado global de la búsqueda en la CSD, recogido en el Capítulo II, es de 1515 compuestos (2988 fragmentos) de níquel, 311 (464) de paladio y 322 (435) de platino. El desglose de éstos para los cuatro casos (N-N, P-P, O-O y S-S) se recoge en la tabla siguiente, en la que *Compuestos* indica cuántos datos se obtienen utilizando el programa ConQuest; *Datos disponibles* son los resultantes después de medir los ángulos de torsión (hay casos que no ofrecen resultados); *Datos (depurados)* ofrece el número definitivo de compuestos una vez eliminados los compuestos repetidos (tienen el mismo *refcode* porque se trata del mismo compuesto obtenido en condiciones diferentes); *Fragmentos* y *Fragmentos (depurados)* siguen el mismo criterio que los compuestos (su número es mayor porque, a veces, un compuesto tiene varios fragmentos).

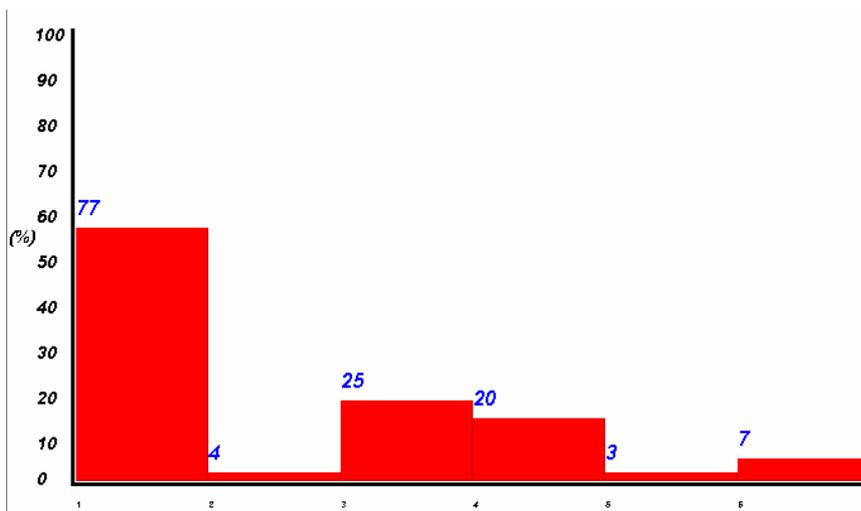
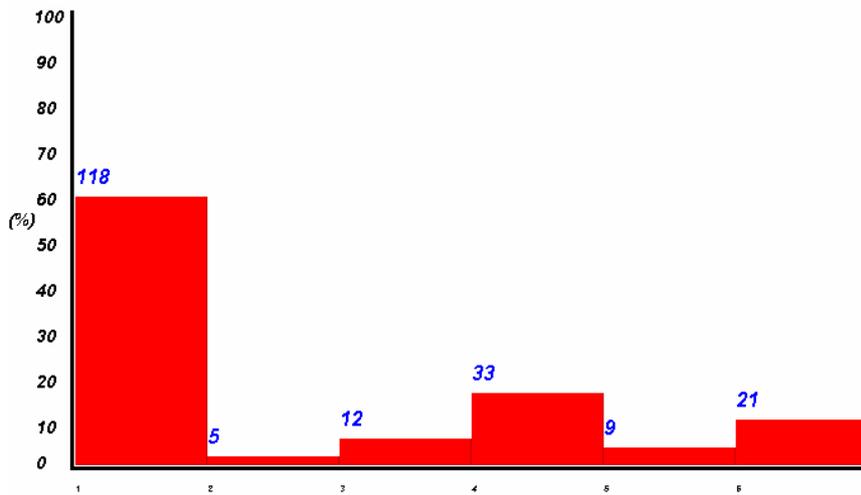
	Compuestos Datos disponibles <b>Datos (depurados)</b> Fragmentos <b>Fragmentos (depurados)</b>		
	níquel	paladio	platino
	1507 1358 <b>1300</b> 2687 <b>2582</b>	127 121 <b>114</b> 210 <b>198</b>	116 99 <b>97</b> 138 <b>136</b>
	109 99 <b>93</b> 177 <b>164</b>	153 148 <b>144</b> 189 <b>184</b>	141 128 <b>124</b> 180 <b>175</b>
	69 61 <b>55</b> 134 <b>128</b>	17 17 <b>17</b> 18 <b>18</b>	96 81 <b>77</b> 92 <b>86</b>
	81 69 <b>67</b> 118 <b>114</b>	42 36 <b>36</b> 64 <b>64</b>	30 27 <b>24</b> 46 <b>38</b>

Al aplicar el Método de Clasificación, descrito anteriormente, a las seis conformaciones del ciclohexano, con  $\sigma = 10^\circ$ , se obtienen los resultados que se recogen en los histogramas siguientes (en cada página, de arriba hacia abajo, níquel, paladio y platino) para cada uno de los cuatro casos estudiados (a excepción de los primeros histogramas que corresponden a los 2582 fragmentos de diaminas de níquel, estudiadas de 1000 en 1000), que numeramos como [1], [2], [3] y [4] (las estructuras [5], [6], [7], [8], [9] y [10] corresponden a los quelatos N-P, N-O, N-S, P-O, P-S y O-S que se estudian en otro Proyecto Fin de Carrera).

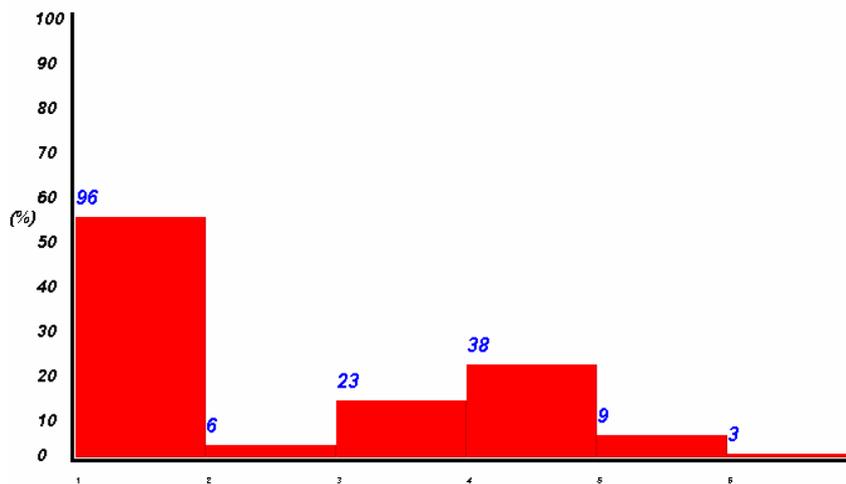
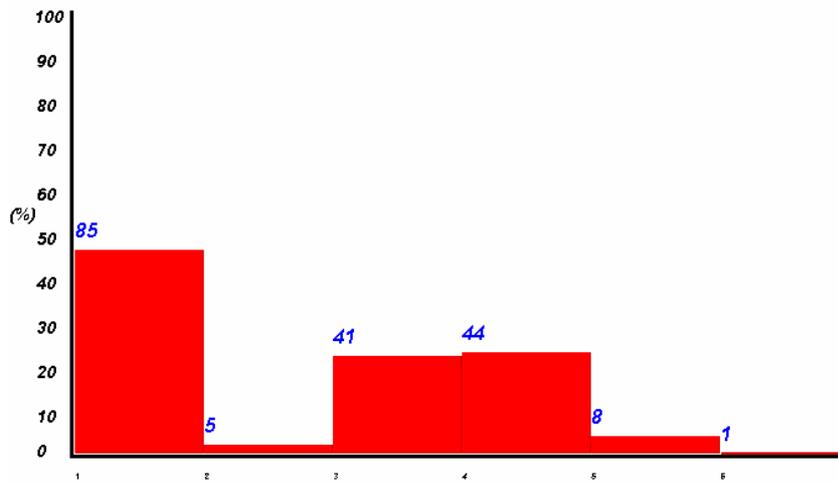
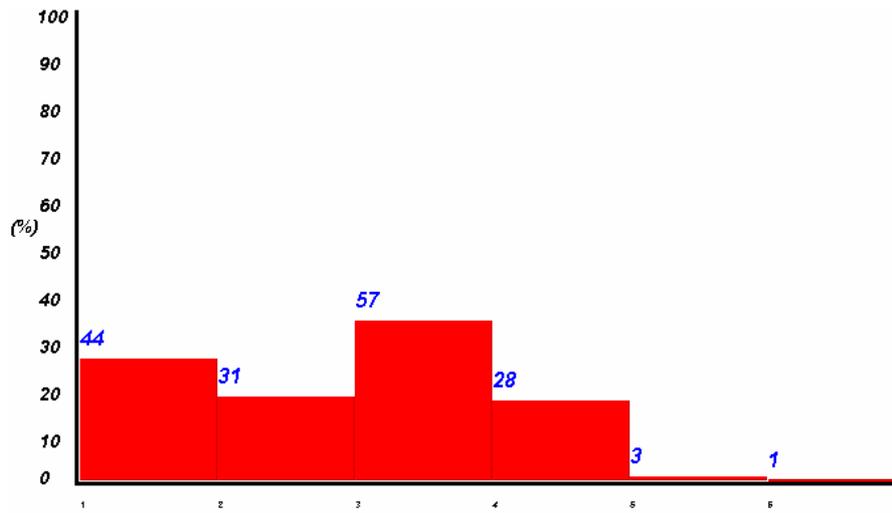


**Estructuras N-N de níquel [1], 2582 fragmentos de las conformaciones *chair* (C), *boat* (B), *twist-boat* (TB), *envelope* (E), *half-chair* (HC) y *screw-boat* (SB), respectivamente**

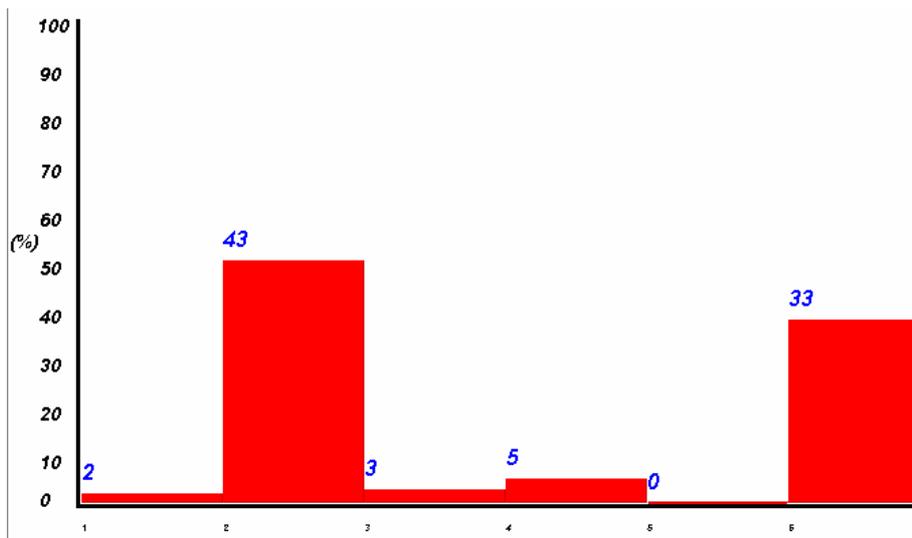
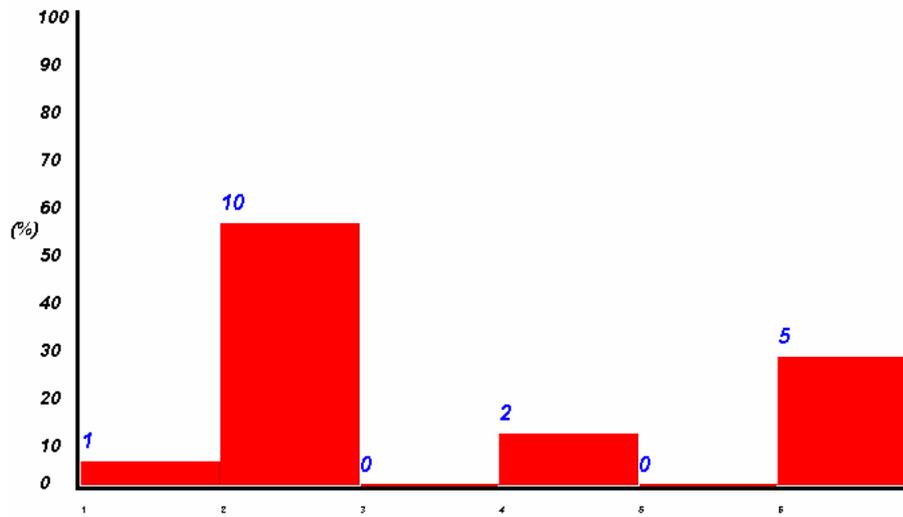
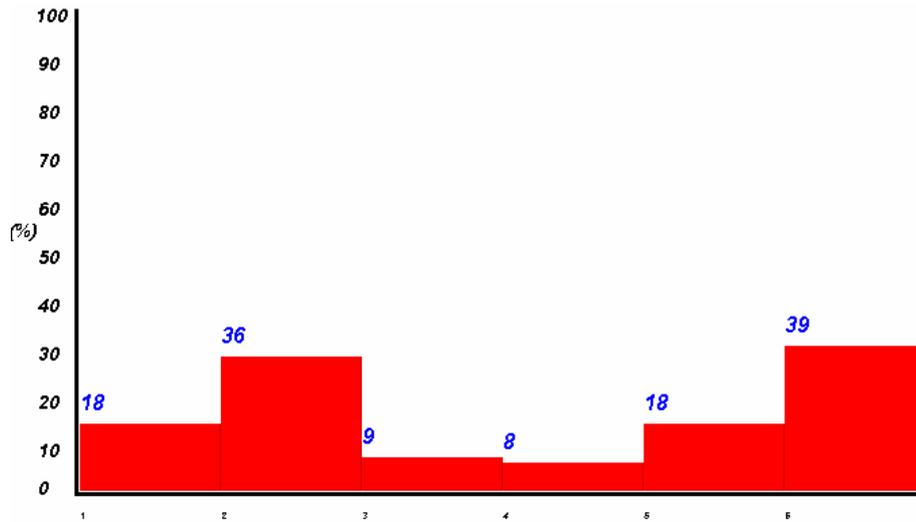
A continuación recogemos los mismos resultados para los otros dos metales de los complejos denominados como [1] y, en las páginas siguientes, el resto de los diferentes casos:



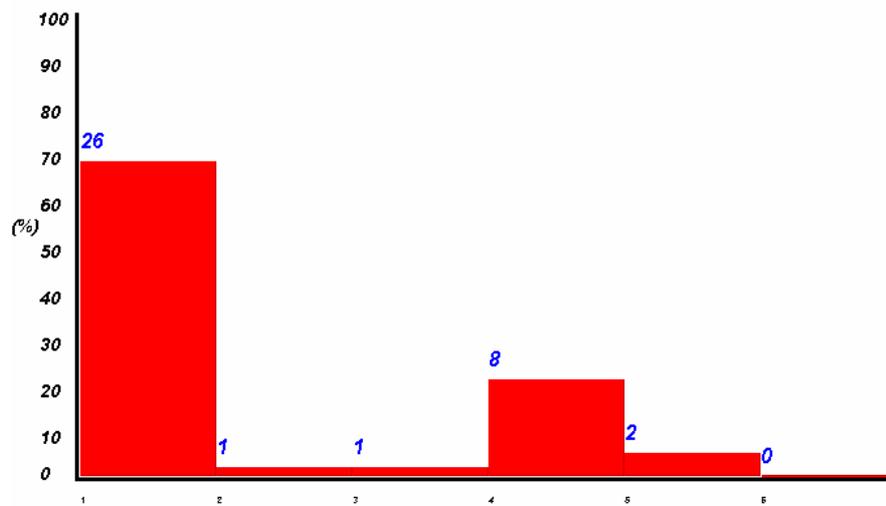
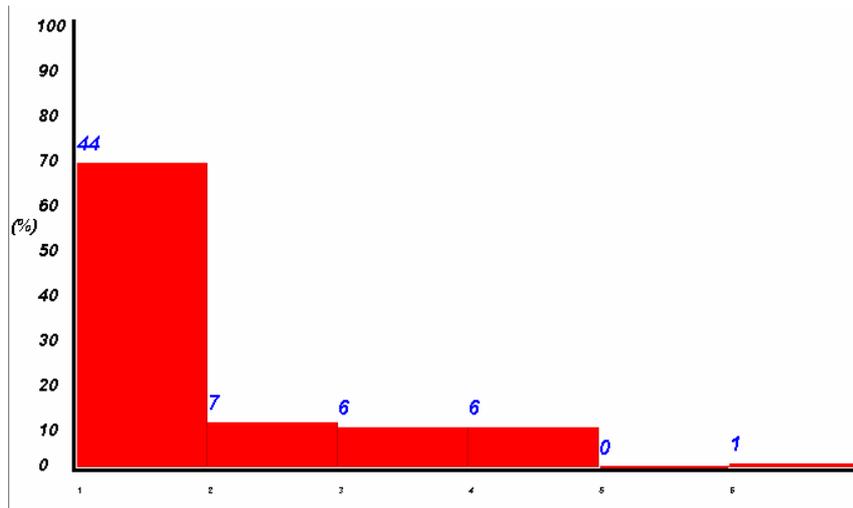
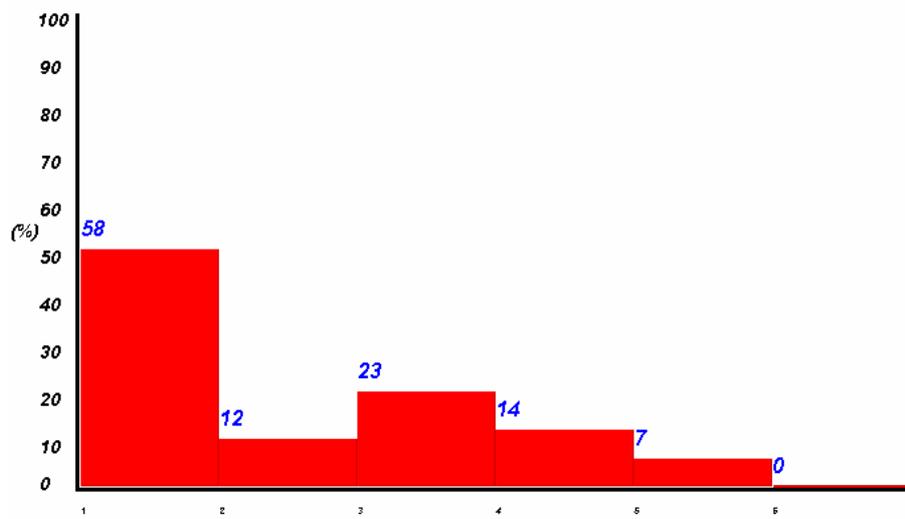
Estructuras N-N de paladio y platino [1]



Estructuras P-P de níquel, paladio y platino [2]



Estructuras O-O de níquel, paladio y platino [3]



Estructuras  
S-S de níquel, paladio y platino [4]

Los resultados obtenidos se resumen en la tabla siguiente:

quelato	conf.	níquel	paladio	platino
N,N [1]	C	1572, <b>60.88%</b>	118, <b>59.60%</b>	77, <b>56.62%</b>
	B	203, <b>7.86%</b>	5, <b>2.53%</b>	4, <b>2.94%</b>
	TB	253, <b>9.80%</b>	12, <b>6.06%</b>	25, <b>18.38%</b>
	E	347, <b>13.44%</b>	33, <b>16.67%</b>	20, <b>14.71%</b>
	HC	130, <b>5.03%</b>	9, <b>4.55%</b>	3, <b>2.21%</b>
	SB	77, <b>2.98%</b>	21, <b>10.61%</b>	7, <b>5.15%</b>
P,P [2]	C	44, <b>26.83%</b>	85, <b>46.20%</b>	96, <b>54.86%</b>
	B	31, <b>18.90%</b>	5, <b>2.72%</b>	6, <b>3.43%</b>
	TB	57, <b>34.76%</b>	41, <b>22.28%</b>	23, <b>13.14%</b>
	E	38, <b>17.07%</b>	44, <b>23.91%</b>	38, <b>21.71%</b>
	HC	3, <b>1.83%</b>	8, <b>4.35%</b>	9, <b>5.14%</b>
	SB	1, <b>0.61%</b>	1, <b>0.54%</b>	3, <b>1.71%</b>
O,O [3]	C	18, <b>14.06%</b>	1, <b>5.56%</b>	2, <b>2.33%</b>
	B	36, <b>28.13%</b>	10, <b>55.56%</b>	43, <b>50.00%</b>
	TB	9, <b>7.03%</b>	0, <b>0.00%</b>	3, <b>3.49%</b>
	E	8, <b>6.25%</b>	2, <b>11.11%</b>	5, <b>5.81%</b>
	HC	18, <b>14.06%</b>	0, <b>0.00%</b>	0, <b>0.00%</b>
	SB	39, <b>30.47%</b>	5, <b>27.78%</b>	33, <b>38.37%</b>
S,S [4]	C	58, <b>50.88%</b>	44, <b>68.75%</b>	26, <b>68.42%</b>
	B	12, <b>10.53%</b>	7, <b>10.94%</b>	1, <b>2.63%</b>
	TB	23, <b>20.18%</b>	6, <b>9.38%</b>	1, <b>2.63%</b>
	E	14, <b>12.28%</b>	6, <b>9.38%</b>	8, <b>21.05%</b>
	HC	7, <b>6.14%</b>	0, <b>0.00%</b>	2, <b>5.26%</b>
	SB	0, <b>0.00%</b>	1, <b>1.56%</b>	0, <b>0.00%</b>

Estos resultados se comentan más adelante al estudiar la deformación de las conformaciones.

## IV.2.- APLICACIÓN DEL PROGRAMA DEL ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA.

Este programa, descrito anteriormente, permite, a diferencia del Método de Clasificación (varía los resultados en función del valor de  $\sigma$ ), obtener “una foto fija” del fragmento a estudiar indicando, de forma aproximada, la magnitud de deformación respecto al teórico. Además, se aplica para las 50 conformaciones teóricas obtenidas mientras que el método matemático sólo se aplica a las 15 conformaciones canónicas expandidas.

Los resultados obtenidos se recogen a continuación en diferentes tablas para los metales níquel, paladio y platino y, para cada uno de ellos, los cuatro casos posibles: N,N [1], P,P [2], O,O [3] y S,S [4]. Además se aportan los resultados del Método de Clasificación para  $\sigma = 10^\circ$ . Esto permite una fácil comparación que nos ayuda a medir el grado de fiabilidad del programa.

Como se observa a continuación, en este estudio apenas hay discrepancias significativas entre ambos programas.

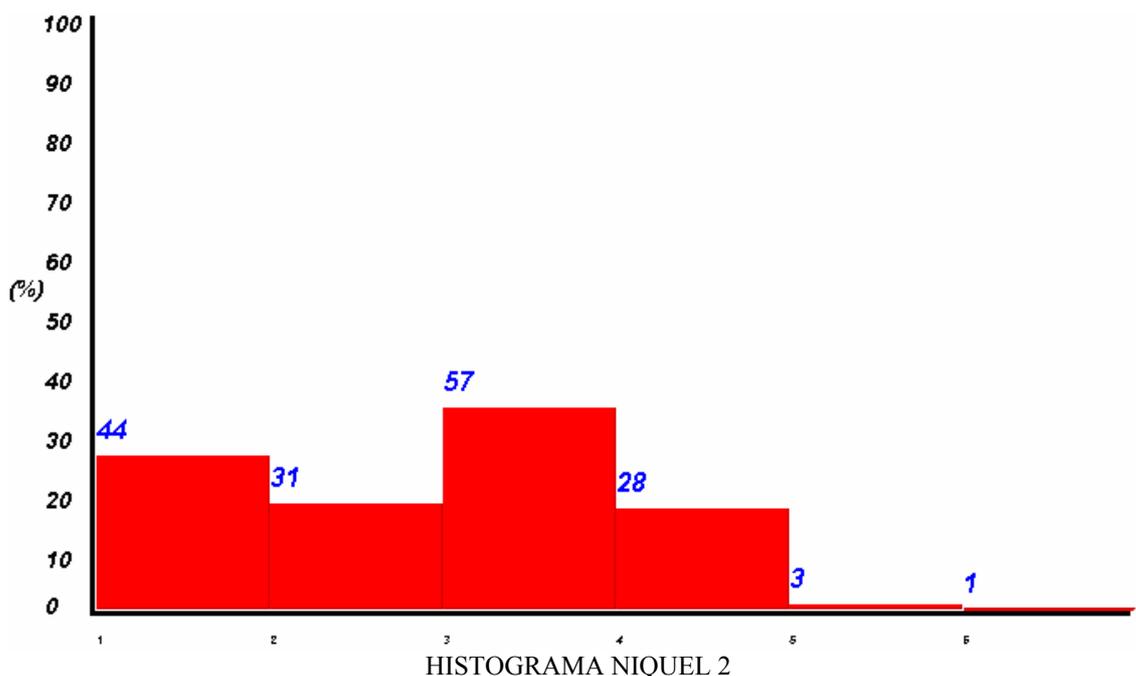
En todas las tablas, en sucesivas columnas, figuran la conformación, el *refcode*, los resultados obtenidos por el Método de Clasificación del Área de Estadística, los resultados obtenidos por el Método del Área de Química Inorgánica y, finalmente, la deformación de la conformación con el valor arrojado por el programa y su equivalencia en grados, según la tabla obtenida en el Capítulo II.

### Níquel [2]

Conf.	<i>Refcode</i>	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	BAXBUX	1.0000 C	34 C1	33→14°
	BEVTAX-1	1.0000 C	33 C2	
	BEVTAX-2	1.0000 C	31 C2	
	BIKLIQ	1.0000 C	28 C2	
	CAVGEM-1	1.0000 C	41 C1	
	CAVGEM-2	1.0000 C	43 C1	
	CUPROU-1	1.0000 C	29 C2	
	CUPROU-2	1.0000 C	40 C2	
	CUTZEW-1	1.0000 C	12 C1	
	CUTZEW-2	1.0000 C	17 C1	
	CUTZIA	1.0000 C	31 C1	
	DIWBUG-1	0.9576 C 0.0218 HC 0.0207 E	49 C1 53 HC3 53 E8	
	FEPQUN	1.0000 C	39 C1	
	FOPZOC	1.0000 C	40 C2	
	GAKDOL	0.9378 C 0.0438 E 0.0185 HC	50 C1 52 E8 54 HC3	
	GESREB-1	1.0000 C	31 C1	
	GESREB-2	1.0000 C	26 C1	
	GUHKEZ	1.0000 C	29 C1	

	LEZYAQ-1 LEZYAQ-3 LUCLUQ-1 LUCLUQ-2 MAPHIV-1 MAPHIV-2 NIMPDC PAYDIN-1 PAYDIN-2 PAJTID-2 PUFNUZ QOSTAT QUKCII RAPTOS-1 RAPTOS-2 SOGLEF-2 SOGLEF-4 TEZHUB TOLNAJ TOLNEN UCUYOH UKEPEF WAQVIT XEYWAZ YAMSOV ZOMMAP	1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9998 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9899 C 0.0066 E 0.0035 HC 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.8691 C 0.0991 E 0.0317 HC 1.0000 C 1.0000 C 0.9658 C 0.0282 E 0.0060 HC 0.4221 C 0.0338 E 0.0240 HC 0.9997 C	32 C1 32 C1 22 C1 21 C1 35 C2 33 C2 43 C1 37 C1 34 C2 48 C2 55 E2 56 HC9 30 C2 25 C2 29 C2 36 C1 33 C1 11 C2 12 C1 32 C2 18 C1 33 C2 51 C2 52 E2 54 HC2 37 C2 28 C2 51 C1 54 E8 58 HC3 52 C2 55 E2 56 HC2 39 C1	
B	BUFREZ-1 BUFREZ-2 BUFREZ-3 CAWFIP-1 CAWFIP-3 CAWPIA DIVDIV-1 DIVDIV-2 DIVDIV-3 GEWVUZ-1 GEWVUZ-2 GEWVUZ-3 HERTH HERTOD-1 HERVOQ PMENIB20-1 PMENIB20-2 PMENIB20-3 PMEPNI10-1 PMEPNI10-2 PMEPNI10-3 P-4 P-5 P-6 PRHCOB10-1 PRHCOB10-2 PRHCOB10-3 SOGLEF-1 SOGLEF-3 TIBBUB-1 TIBBUB-3	0.9945 B 0.0029 TB 0.0026 SB 0.9939 B 0.0061 TB 1.0000 B 0.9361 B 0.0639 TB 0.8023 B 0.1970 TB 1.0000 B 0.9854 B 0.0146 TB 0.9839 B 0.0161 TB 0.7025 B 0.2975 TB 0.8695 B 0.1305 TB 0.8870 B 0.1130 TB 0.6940 B 0.3060 TB 1.0000 B 0.9918 B 0.0081 TB 0.8224 B 0.1723 TB 0.0053 SB 0.6216 B 0.3784 TB 0.9063 B 0.0937 TB 0.9851 B 0.0149 TB 0.9992 B 0.9974 B 0.0026 TB 0.9964 B 0.0036 TB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9369 B 0.0631 TB 0.9996 B 0.9993 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9820 B 0.0180 TB 0.9392 B 0.0608 TB	40 B2 52 SB9 53 TB6 25 B5 41 TB5 16 B2 30 B5 38 TB5 36 B5 40 TB5 26 B2 27 B2 39 TB6 32 B5 43 TB5 33 B2 36 TB6 33 B5 38 TB5 31 B2 37 TB6 33 B5 36 TB5 34 B5 35 B5 47 TB3 41 B5 45 TB3 50 SB3 34 B2 35 TB2 35 B5 41 TB3 34 B2 35 TB2 25 B2 30 B5 46 TB5 27 B2 43 TB6 25 B2 21 B5 22 B2 33 B5 41 TB5 33 B2 23 B5 18 B2 19 B5 26 B2 39 TB2 36 B2 43 TB2	29→12°
TB	BOMPIC-1 BOMPIC-2 BOMPIC-3 CAFSOR-1 CAFSOR-2 CAFSOR-3 CAWFIP-2 CAWPUG-1 CAWPUG-2 CUGWOK-1 CUGWOK-2 CUGWOK-3 DIMFAG10-1 DIMFAG10-2 DIMFAG10-3 DPMENI10-1 DPMENI10-2	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.5053 TB 0.4947 B 0.9999 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB	16 TB3 22 TB2 23 TB3 20 TB3 15 TB2 18 TB3 35 TB6 35 B2 25 TB2 23 TB2 17 TB3 27 TB2 20 TB3 29 TB6 21 TB5 15 TB6 19 TB3 28 TB2	22→9°

	DPMENI10-3	1.0000 TB		20 TB3	
	DUMSUZ-1	1.0000 TB		18 TB2	
	DUMSUZ-2	1.0000 TB		14 TB3	
	DUMSUZ-3	1.0000 TB		29 TB2	
	FONMUQ-1	1.0000 TB		16 TB6	
	FONMUQ-2	0.9998 TB		16 TB6	
	FONMUQ-3	1.0000 TB		26 TB5	
	FUPZUF	0.9989 TB	0.0011 B	29 TB4	47 B3
	HERTOU-2	0.9684 TB	0,0316 B	30 TB6	40 B2
	HERTUU-1	1.0000 TB		23 TB5	
	HERTUU-2	1.0000 TB		23 TB5	
	HERVUW-1	0.9999 TB		24 TB6	
	HERVUW-2	1.0000 TB		22 TB5	
	HERVUW-3	1.0000 TB		22 TB6	
	HERVUW-4	1.0000 TB		22 TB5	
	KAWFEP	0.9979 TB	0.0021 B	47 TB2	59 B4
	LEZYAQ-2	1.0000 TB		20 TB2	
	LEZYAQ-4	0.9999 TB		23 TB1	
	LEZROX-1	0.6562 TB	0.3438 SB	40 TB5	40 SB8
	OKUFUV	1.0000 TB		9 TB1	
	PMENSE-1	1.0000 TB		21 TB3	
	PMENSE-2	1.0000 TB		23 TB2	
	PMENSE-3	1.0000 TB		18 TB3	
	QUSTEX	1.0000 TB		8 TB4	
	QUSTIB	1.0000 TB		8 TB4	
	SXPMNI-1	1.0000 TB		17 TB2	
	SXPMNI-2	1.0000 TB		22 TB3	
	SXPMNI-3	1.0000 TB		19 TB2	
	TAHQAV	0.6692 TB	0.3308 B	32 TB4	34 B3
	TIBBUB-2	0.7724 TB	0.2276 B	32 TB3	36 B5
	TPHSNI-1	1.0000 TB		24 TB6	
	TPHSNI-2	1.0000 TB		18 TB5	
	TPHSNI-3	1.0000 TB		24 TB6	
	VALGEV	1.0000 TB		12 TB4	
	XAXQUJ-1	1.0000 TB		26 TB5	
	XAXQUJ-2	1.0000 TB		17 TB6	
	XAXQUJ-3	1.0000 TB		18 TB5	
	YUBGUR-1	0.9997 TB		32 TB3	
	YUBGUR-2	1.0000 TB		17 TB2	
	YUBGUR-3	0.9918 TB	0.0082 B	27 TB3	41 B5
E	COKNEV	0.9590 E	0.0410 HC	15 E8	29 HC8
	COPRNI	0.9445 E	0.0552 HC	45 E8	52 HC3
	DEZHUL	0.9994 E		32 E2	
	DIWBUG-2	0.9623 E	0.0377 HC	34 E2	44 HC2
	ECLNIA	0.9928 E	0.0072 HC	12 E8	35 HC3
	GESZEY	0.9662 E	0.0338 HC	15 E2	30 HC2
	HAFZUK	0.9244 E	0.0722 HC	0.0034 C	46 E8 53 HC3, HC8 60 C1
	HAGBAT	0.8303 E	0.1689 HC	42 E8	46 HC8
	HPCHPN-1	0.9763 E	0.0232 HC	22 E8	35 HC3
	HPCHPN-2	0.0921 E	0.0409 SB	0.0369 HC	19 E8 31 SB8 32 HC8
	JEGNAK	0.9667 E	0.0333 HC	29 E2	39 HC2
	KESRUV	0.9451 E	0.0549 HC	28 E2	39 HC2
	LIBDOP	0.9056 E	0.0944 HC	39 E2	45 HC9
	NIHBUB	0.9817 E	0.0183 HC	30 E8	41 HC3
	PAJTID-1	0.9850 E	0.0150 HC	42 E8	52 HC8
	PUJSOC-1	0.9174 E	0.0826 HC	31 E2	38 HC9
	PUJSOC-2	0.8546 E	0.1453 HC	49 E2	53 HC9
	PUPWEC	0.9960 E	0.0039 HC	17 E8	38 HC8
	QUKCOO	0.6579 E	0.2226 HC	0.1195 C	48 E8 51 HC8 55 C1
	TAHRUO	0.9610 E	0.0390 HC	20 E2	38 HC2
	TAHQEZ	0.9108 E	0.0892 HC	28 E2	37 HC2
	TAHRUQ	0.5729 E	0.4081 HC	0.0190 C	42 E2 44 HC2 53 C2
	VALGAR	0.9321 E	0.0679 HC	25 E8	34 HC3
	WIFNII	0.9306 E	0.0694 HC	24 E8	33 HC8
	XAXRAQ	0.7931 E	0.2069 HC	34 E8	38 HC3
	XIYPOK	0.9988 E	0.0112 HC	23 E2	39 HC9
	ZOMET-1	0.8251 E	0.1745 HC	40 E8	45 HC8
	ZOMET-2	0.8586 E	0.1413 HC	38 E2	44 HC2
HC	LAVWAG	0.8427 HC	0.0698 E 0.0874 C	43 HC8	49 E8 52 C1
	LEZROX-2	0.5946 HC	0.4041 E 0.0013 C	45 HC3	46 E8 60 C1
	PUJSOC-3	0.9791 HC	0.0148 E 0.0061 SB	26 HC2	41 E7 41 SB2
SB	BAXCAE	0.9987 SB		32 SB8	
<b>Deformación global 28→12°</b>					



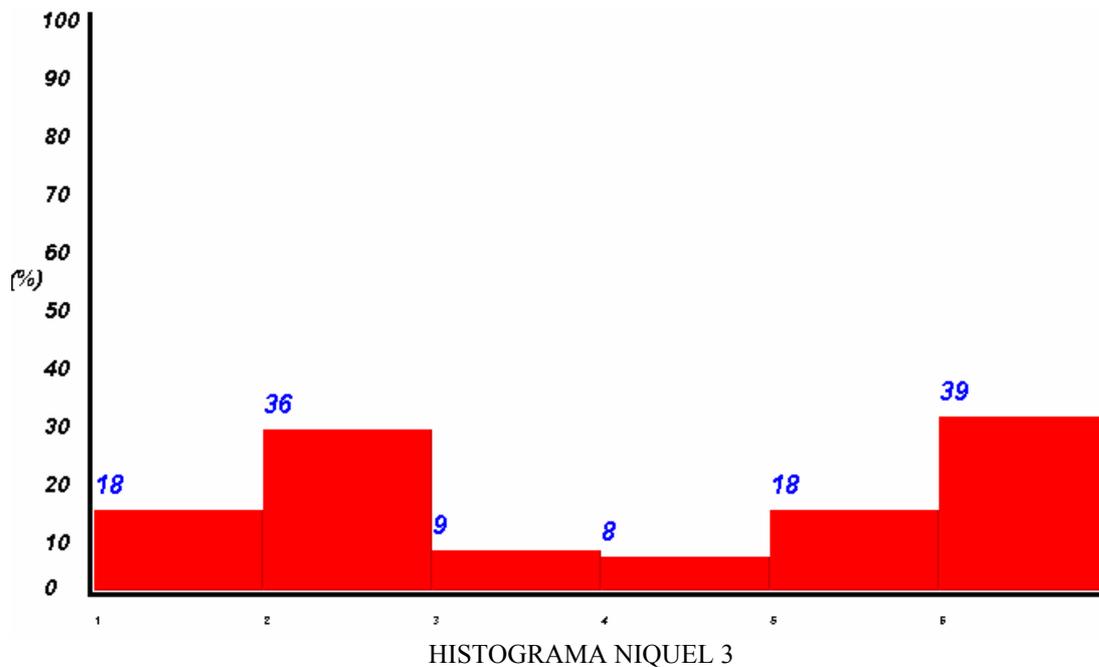
La configuración más abundante es la *twist-boat* con un 35% y una desviación media de 9°, seguida de la *chair* con un 27% y una desviación de 14°. La desviación media global es de 12°.

### Níquel [3]

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	AGIDEZ	1.0000 C	23 C1	28 → 11°
	BIZWEM	0,9989 C	37 SB8	
	DEGROW	1.0000 C	20 C2	
	EZIGAV-1	1.0000 C	27 C1	
	EZIGAV-2	1.0000 C	31 C2	
	HUHNED-6	0.9503 C 0.0473 HC 0.0024 E	47 C2 55 E7 49 HC7	
	LENQOK-1	1.0000 C	27 C1	
	LENQOK-2	1.0000 C	33 C2	
	LENQOK-3	1.0000 C	23 C1	
	NICITA-3	1.0000 C	39 C1	
	RELDOB-1	1.0000 C	28 C2	
	RELDOB-2	1.0000 C	29 C1	
	RELDOB-3	1.0000 C	25 C2	
	SAVBIB-1	1.0000 C	10 C1	
	SAVBIB-2	1.0000 C	17 C2	
	SAVBIB-3	1.0000 C	16 C1	
	XEZFIR-6	0.5829 C 0.4089 HC 0.0082 E	46 HC1 49 C1 54 E12	
XIBJEY	1.0000 C	32 C1		

B	AMIMIS BEWKIX BOWCOF CEHVUH-2 FRCTNI GAFCUL GEWQOO HUHNED-9 HUHNIH-9 HUPQOY-2 HUPQUE-1 HUPQUE-3 HUPQUE-4 HUPQUE-5 HUPQUE-6 HUPQUE-7 HUPQUE-8 IJOVUY IJOWAF KEXKII-1 KEXKII-2 NICITA-1 NICITA-2 OGIHUH PEWHAG VEZFOV XEVXAY-1 XEVXAY-2 XEVXAY-3 XEVXAY-4 XEVXEC-1 XEVXEC-2 XEVXEC-3 XEVXEC-4 XEZFIR-9 XIBJAU	1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 0.7169 B 0.2585 SB 0.0246 TB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9999 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9916 B 0.0082 SB 0.9734 TB 0.0229 SB 0.0037 SB 0.7417 B 0.2048 TB 0.0535 SB 1.0000 B 0.9995 B 0.6386 B 0.3164 SB 0.0450 TB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9995 B 0.9981 B 0.0017 TB 1.0000 B 0.9995 B 1.0000 B 0.9988 B 0.0012 TB 0.9988 B 0.0012 TB 0.9954 B 0.0046 TB 0.9999 0.9999 B 0.9996 B 1.0000 B 0.9849 B 0.0151 TB 0.7299 B 0.2687 SB 0.0010 TB 1.0000 B	22 B5 19 B5 48 C2 44 B2 45 SB2 51 TB2 21 B5 24 B5 24 B2 34 B4 28 B1 23 B5 41 B5 50 SB3 38 B5 47 TB5 50 SB8 42 B2 45 TB2 46 SB2 34 B5 36 B2 44 SB3, B5 49 TB3 30 B2 21 B2 21 B2 22 B2 20 B5 37 B2 36 B5 51 TB5 23 B5 37 B2 34 B2 30 B2 47 TB2 29 B2 47 TB2 31 B5 45 TB5 26 B2 27 B2 28 B5 22 B5 34 B2 44 TB2 43 B1 44 SB8 56 TB5 19 B6	30 → 13°
TB	CEHVUH-1 HUHNED-4 HUOQUE-9 HUPQOY-4 NICITA-5 XEZFIR-4 XEZFOX-1 XEZFOX-5 XEZFOX-6	0.9766 TB 0.0227 SB 0.7393 TB 0.2607 SB 0.9965 TB 0.0035 SB 0.9999 TB 0.9981 TB 0.0017 SB 0.9800 TB 0.0200 SB 0.5276 TB 0.4724 SB 0.9989 TB 0.9933 TB 0.0067 B	38 TB2 45 SB2 35 TB5 36 SB8 29 TB2 43 SB2 25 TB5 31 TB5 45SB8 31 TB2 40 SB2 35 SB8 36 TB5 30 TB6 31 TB5 45 B1	29 → 12°
E	HUHNED-10 MEPDER MUSQUM NASCUF PEZTAQ XEZFIR-8 XEZFOX-3 XEZFOX-9	0.8087 E 0.1905 HC 0.9212 E 0.0700 HC 0.0018 SB 0.9930 E 0.0070 HC 0.5355 E 0.2969 HC 0.1676 SB 0.5698 E 0.4052 SB 0.0249 HC 0.5389 E 0.4603 HC 0.9312 E 0.0688 HC 0.5693 E 0.3597 HC 0.0709 SB	26 E12 31 HC1 19 E8 29 HC8 40 SB8 22 E8 40 HC3, HC8 33 E12 35 HC1 58 E1 27 E2 29 SB2 37 HC2 31 E6,HC7 47 SB7 22 E1 32 HC1 28 E1 30 HC1 35 SB1	26 → 11°
HC	BULTAD EXENIE HUHNED-8 HUHNIH-3 HUHNIH-6 HUHNIH-8 HUHNIH-10 HUPQOY-3 MEHZEE NASDAM NICITA-4 NICITA-6 QEXQE-Q-2 UDUXAS XEZFIR-3 XEZFIR-10 XEZFOX-8 YIDHEZ	0.9633 HC 0.0366 E 0.6543 HC 0.3300 SB 0.0157 E 0.7291 HC 0.2706 E 0.7172 HC 0.2684 SB 0.0144 E 0.9635 HC 0.0364 E 0.6578 HC 0.3421 E 0.8235 HC 0.1765 E 0.8596 HC 0.1360 E 0.0045 SB 0.9775 HC 0.0225 E 0.9522 HC 0.9476 E 0.5889 HC 0.4073 E 0.0038 SB 0.9070 HC 0.0693 SB 0.0237 E 0.6383 HC 0.3097 SB 0.0520 E 0.5405 HC 0.3891 E 0.0703 C 0.6388 HC 0.2511 SB 0.1102 E 0.5073 HC 0.4926 E 0.8129 HC 0.1146 SB 0.0725 E 0.9861 HC 0.0135 E	28 HC1 38 E1 33 HC1 35 SB1 43 E1 32 HC1 35 E12 21 HC2 25 SB2 36 E7 33 HC1 42 E12 30 HC7 32 E6 33 HC7 38 E6 34 HC1 39 E12 47 SB1 38 HC7 47 E6 26 HC7 36 E7 35 HC1 36 E12 47 SB1 15 HC8 27 CB8 37 E8 49 HC2 51 SB2 54 E7 44 HC8, E8 46 HC3 20 HC2 24 SB2 27 E7 31 HC7, E6 19 HC8 29 E1 42 E8 31 HC1 44 E1	31 → 13°

SB	ATUPUA BHEXNI DAYXUX01 FAWNUM FONBAM HUHNED-1 HUHNED-2 HUHNED-3 HUHNED-5 HUHNED-7 HUHNIH-1 HUHNIH-2 HUHNIH-4 HUHNIH-5 HUHNIH-7 HUPQOY-1 HUPQOY-5 HUPQUE-2 HUPQUE-10 IQUFOP KEZFUL MOYZUV PÉGALE-1 PÉGALE-2 QARTOT-1 QARTOT-2 QARTUZ-1 QARTUZ-2 QEQTUB QEXQE-1 XEZFIR-1 XEZFIR-2 XEZFIR-5 XEZFIR-7 XEZFOX-2 XEZFOX-4 XEZFOX-7 XEZFOX-10 YEQHEI	0.9789 SB 0.0169 HC 0.0042 E 0.9997 SB 1.0000 SB 0.9893 SB 0.0089 B 0.0018 TB 0.0078 SB 0.0021 HC 0.9982 SB 0.0016 HC 0.9294 SB 0.0510 HC 0.0195 E 0.8323 SB 0.1187 HC 0.0490 E 0.7405 SB 0.2586 E 0.9931 SB 0.0062 E 0.9992 SB 0.6166 SB 0.2900 E 0.0934 HC 0.9109 SB 0.0891 TB 0.9996 SB 0.0035 DB 0.0047 B 0.0015 E 0.9869 SB 0.0131 TB 0.9489 SB 0.0401 E 0.0110 HC 0.5361 SB 0.4609 B 0.0012 E 0.5119 SB 0.4677 TB 0.0203 B 0.9989 SB 0.0010 HC 0.9992 SB 1.0000 SB 0.8848 SB 0.1142 E 0.0010 HC 0.9975 SB 0.0023 E 0.9828 SB 0.0138 HC 0.0033 E 0.9931 SB 0.0066 HC 0.9796 SB 0.0195 HC 0.9658 SB 0.0318 HC 0.0024 E 0.9671 SB 0.0234 HC 0.0095 E 0.9998 SB 0.9980 SB 0.0015 HC 0.9989 SB 0.7831 SB 0.2161 E 0.0085 SB 0.0012 E 0.5092 SB 0.3600 E 0.1308 HC 0.9995 SB 0.6141 SB 0.3859 TB 0.9722 SB 0.0183 HC 0.0095 E 0.9745 SB 0.0252 E	60 SB11 63 SB6 66 HC11 37 SB8 59 SB1, SB4 41 SB8 53 B5 56 TB5 35 SB7 50 HC7 15 SB8 39 HC8 27 SB1 36 HC1 39 E12 22 SB8 29 HC8 32 E1 39 SB2 41 E2 28 SB2 43 E7 20 SB2 31 SB7 33 E6 36 HC7 32 SB2 40 TB2 30 SB8 38 SB8 51 B1 52 E1 35 SB9 47 TB6 23 SB8 34 E1 37 HC8 45 SB9 47 B2 57 TB6, E2 40 SB8 42 TB5 49 B5 78 SB1, SB4 75 SB1 19 SB3 49 SB2 53 E7 61 HC2 43 SB8 55 E1 55 SB12 61 SB5 38 SB8 49 HC8 22 SB9 35 HC9 22 SB3 34 HC3 41 E8 33 SB1 43 HC1 45 E12 31 SB9 21 SB2 42 HC2 26 SB7 36 SB8 39 E8 26 SB8 45 E1 24 SB8 26 E1 29 HC9 38 SB7 34 SB8 37 TB5 28 SB7 40 HC7 41 E7 35 SB9 44 E2	36 → 15°
<b>Deformación global 31 → 13°</b>				



La configuración mayoritaria es la *screw-boat* con un 30% de abundancia y una desviación media de 15°, la siguiente es la *boat* con el 28% y una desviación de 13°. La desviación media global es 13°.

---

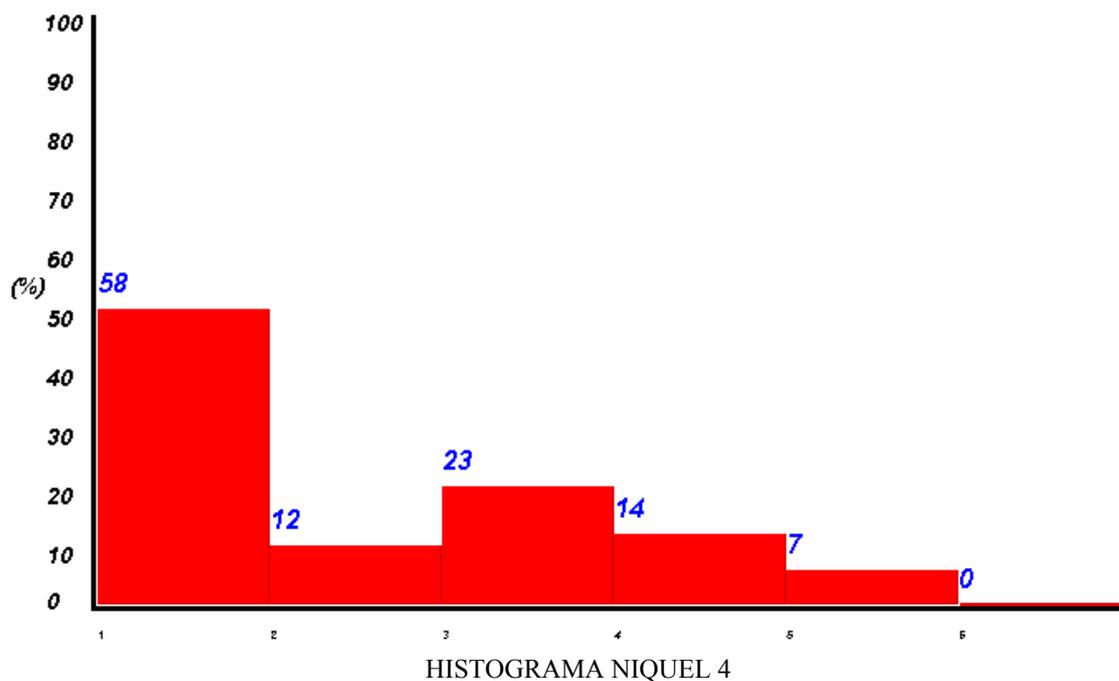


---

**Níquel [4]**

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	BTZDNI	1.0000 C	27 C1	27→11°
	BUKZAI	1.0000 C	23 C1	
	CIJYID-2	1.0000 C	28 C1	
	DOYDOK-2	1.0000 C	37 C1	
	GEGYOG-2	0.9952 C 0.0037 E 0.0011 HC	50 C1 57 E8 59 HC8	
	HBTDNI	1.0000 C	28 C1	
	KIBBIH-2	1.0000 C	28 C2	
	KIGXED	1.0000 C	16 C2	
	KURLIS-1	1.0000 C	37 C2	
	KUZREA	1.0000 C	24 C2	
	LAZVUE-1	1.0000 C	52 C2	
	LAZVUE-2	1.0000 C	25 C1	
	LAZWUF-2	1.0000 C	15 C1	
	MAXSIN-1	1.0000 C	22 C1	
	MAXSIN-2	1.0000 C	32 C2	
	MAXSOT	1.0000 C	19 C1	
	MAXSUC	1.0000 C	23 C2	
	MAXTAG-1	1.0000 C	20 C1	
	MAXTAG-2	1.0000 C	17 C2	
	MAXTEK-1	1.0000 C	25 C1	
	MAXTEK-2	1.0000 C	31 C1	
	NEYBAU-1	1.0000 C	27 C2	
	NEYBAU-2	1.0000 C	35 C1	
	PASGEV	1.0000 C	22 C1	
	PHDTNI10	1.0000 C	28 C1	
	PINBET	1.0000 C	35 C2	
	PITVIX-1	1.0000 C	42 C2	
	PITVIX-2	1.0000 C	43 C2	
	PITVUJ-2	1.0000 C	33 C2	
	PITVUJ-3	1.0000 C	32 C1	
	PITVUJ-5	1.0000 C	28 C2	
	PITVUJ-7	1.0000 C	30 C1	
	PTNNIB10	1.0000 C	27 C1	
	REGWEF-1	1.0000 C	23 C1	
	REGWEF-2	1.0000 C	20 C2	
	ROPXID	1.0000 C	27 C2	
	ROQSIZ-1	1.0000 C	17 C1	
	ROQSIZ-4	1.0000 C	28 C2	
	SUGVEV-1	1.0000 C	15 C1	
	SUGVEV-2	1.0000 C	23 C1	
	SUGVOF-1	1.0000 C	22 C2	
	SUGVOF-2	1.0000 C	25 C2	
	SUGWAS-1	1.0000 C	52 C1	
	SUGWAS-2	1.0000 C	25 C2	
	TEQLIK	1.0000 C	26 C2	
	TETGEE	1.0000 C	31 C2	
	TTCDNI	1.0000 C	20 C1	
	UJUZAA-1	1.0000 C	13 C2	
	UJUZAA-2	1.0000 C	28 C2	
	UJUZAA-3	1.0000 C	20 C1	
WEBSUR-1	1.0000 C	23 C1		
WEBSUR-2	1.0000 C	30 C1		
WEMCUM	1.0000 C	20 C1		
WESHIM-2	1.0000 C	13 C1		
XISKEP	1.0000 C	24 C2		
YIZSOP-4	1.0000 C	29 C2		
ZICSIN-1	1.0000 C	35 C2		
ZICSIN-2	1.0000 C	43 C1		

B	CIJYID-1	1.0000 B		28 B5	23→9°	
	KIBBIH-1	0.9997 B		40 B2		
	LAZWEP	1.0000 B		16 B2		
	LAZWOZ	1.0000 B		16 B2		
	LAZWUF-1	1.0000 B		22 B5		
	LECCOM	1.0000 B		14 B2		
	QAPTOR	1.0000 B		24 B2		
	QAPTUX-1	1.0000 B		24 B5		
	QAPTUX-2	1.0000 B		23 B2		
	TETGAA	1.0000 B		29 B5		
	WESHIM-1	1.0000 B		20 B5		
	YIZSOP-3	1.0000 B		24 B2		
	BAWMES	1.0000 TB		20 TB1		26→11°
	DOYDOK-1	1.0000 TB		20 TB1		
	DUZZUT-1	1.0000 TB		26 TB3		
DUZZUT-2	1.0000 TB		30 TB2			
DUZZUT-3	1.0000 TB		29 TB3			
GEGYOG-3	0.9938 TB	0.0062 SB	34 TB1 45 SB1			
KURLIS-2	1.0000 TB		26 TB4			
LAZXAM	1.0000 TB		16 TB1			
LEFJUB	1.0000 TB		23 TB3			
PITVUJ-1	1.0000 TB		24 TB1			
PITVUJ-4	1.0000 TB		26 TB1			
PITVUJ-6	1.0000 TB		24 TB1			
PITVUJ-8	1.0000 TB		23 TB1			
QARDAO	1.0000 TB		18 TB2			
ROQSIZ-2	0.9997 TB		32 TB3			
ROQSIZ-3	0.9434 TB	0.0566 SB	36 TB6 42 SB9			
UDDON	1.0000 TB		16 TB4			
YOYS10-1	1.0000 TB		25 TB6			
YOYS10-2	1.0000 TB		30 TB3			
YOYS10-3	1.0000 TB		25 TB5			
YOYS10-4	1.0000 TB		28 TB2			
YOYS10-5	1.0000 TB		34 TB6			
YOYS10-6	1.0000 TB		28 TB3			
DAFBAO	0.9431 E	0.0568 HC	33 E8 41 HC3	37→15°		
DAFBES	0.9963 E	0.037 HC	30 E8 45 HC8			
DOYDOK-3	0.9163 E	0.0735 HC	0.0102 SB		35 E2 41 HC9 46 SB9	
FIBCOJ	0.8073 E	0.1927 HC			29 E8 33 HC8	
GEGYOG-1	0.8697 E	0.1302 HC			39 E8 43 HC3	
PAHGEK-1	0.8804 E	0.1196 HC			37 E2 42 HC9	
PAHGEK-2	0.6274 E	0.3726 HC			39 E8 40 HC3	
PAHG10	0.6887 E	0.3113 HC			40 E8 42 HC8	
TACTOG	0.8827 E	0.1173 HC			46 E8 50 HC3	
WAXDII-1	0.8130 E	0.1278 SB	0.0593 HC		42 E9 46 SB9 48 HC9	
WAXDOO-1	0.9710 E	0.0290 HC			37 E8 45 HC8	
YIZSOP-1	0.8580 E	0.1415 SB			40 E8 44 SB8	
YIZSOP-2	0.9984 E	0.0015 SB			40 E2 54 SB2	
XICSOT	0.3996 E	0.3745 SB	0.2260 HC		24 E7 24 SB7 26 HC7	
JOGTOO	0.8833 HC	0.1123 E	0.0044 SB		26 HC2 33 E2 42 SB2	
LALCAC	0.9685 HC	0.0315 E		45 HC9 52 E2		
QADHUY	0.8555 HC	0.1281 SB	0.0164 E	47 HC9 51 SB9 55 E9		
SOZMEZ	0.9422 HC	0.0578 E		54 HC2 59 E2		
WAXDII-2	0.8666 HC	0.1208 E	0.0126 SB	46 HC8 50 E8 54 SB8		
WAXDOO-2	0.8778 HC	0.1211 E	0.0011 SB	33 HC8 39 E8 49 SB8		
WESHEI	0.9435 HC	0.0541 E	0.0024 SB	32 HC2 40 E2 47 SB2		
<b>Deformación media global 29→12°</b>					40→17°	



Las conformaciones mayoritarias son la *chair* y la *twist-boat*, con una abundancia de 51 y 20% respectivamente, y una desviación media de 11° para ambos casos. La desviación media global es 12°.

#### Paladio [1]

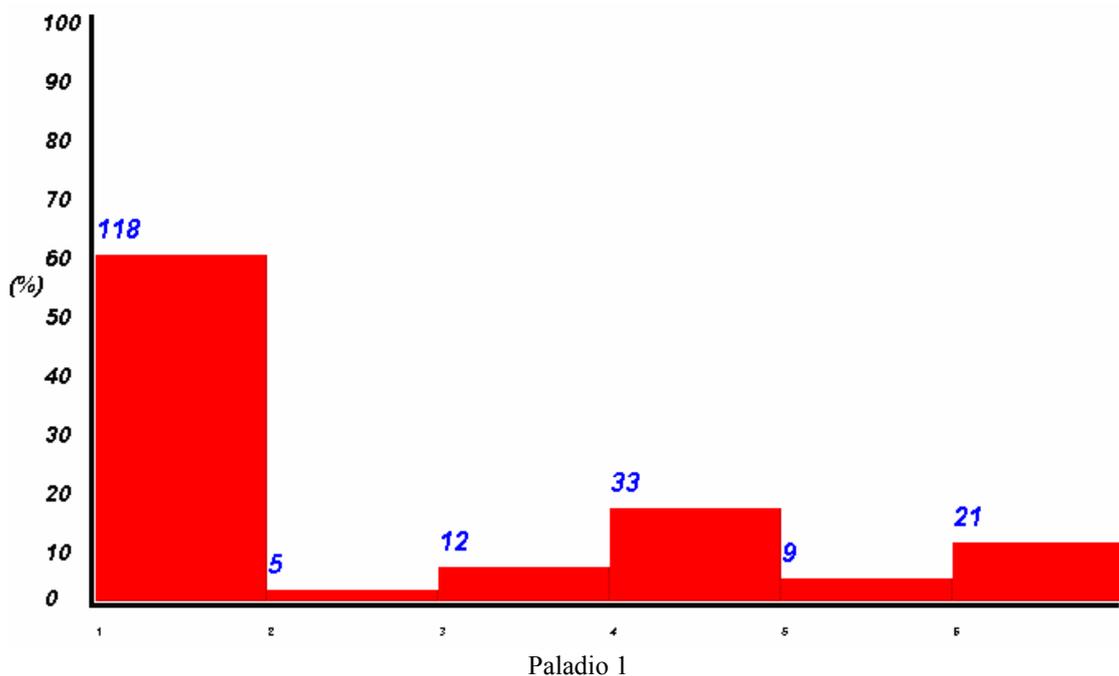
Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	BAQGOP	1.0000 C	15 C2	26→11°
	BAQGVU-2	1.0000 C	15 C2	
	BEPLOY-1	1.0000 C	20 C2	
	B-2	1.0000 C	16 C1	
	BEPLUE-1	1.0000 C	15 C2	
	B-2	1.0000 C	13 C2	
	B-3	1.0000 C	20 C1	
	B-4	1.0000 C	21 C1	
	BEPMAL-1	1.0000 C	13 C2	
	B-2	1.0000 C	18 C1	
	BEPMEP-1	1.0000 C	18 C2	
	B-2	1.0000 C	17 C2	
	B-3	1.0000 C	13 C1	
	B-4	1.0000 C	12 C1	
	BEPMIT-1	1.0000 C	13 C2	
	B-2	1.0000 C	13 C1	
	BEQLUE-1	1.0000 C	12 C1	
	B-2	1.0000 C	23 C1	
	CBUXSES10	1.0000 C	34 C1	
	BUXSIW-1	1.0000 C	39 C2	
	B-2	1.0000 C	36 C2	
	BUXSOC-1	0.5145 C 0.4742 HC 0.0113 E	45 HC3 39 C1 53 E8	
	B-2	1.0000 C	36 C2	
	CADYAS-1	1.0000 C	39 C1	
	CADJAS-2	1.0000 C	36 C2	
	CADKUN-1	0.8911 C 0.1237 HC 0.0752 E	49 C1 49 HC3 50 E8	
	C-2	1.0000 C	41 C1	
	C-3	0.9994 C	44 C2	
	C-4	0.9999 C	43 C2	
	CADLEY-1	1.0000 C	41 C2	
C-2	1.0000 C	40 C2		
DAMMPD10-1	1.0000 C	30 C2		

D-2	1.0000 C		41 C2	
DUJSUW	1.0000 C		39 C2	
EFIHUW-1	1.0000 C		18 C2	
E-2	1.0000 C		23 C1	
EHUNAW-1	1.0000 C		18 C2	
E-2	1.0000 C		23 C1	
FAZYEK-1	1.0000 C		25 C1	
F-2	1.0000 C		18 C1	
FEHJEI	1.0000 C		15 C2	
FEHJIM	1.0000 C		16 C2	
HDPDNT10	1.0000 C		36 C1	
ILODIU-1	1.0000 C		13 C2	
I-2	1.0000 C		16 C1	
IXIJOD-1	1.0000 C		35 C1	
I-2	1.0000 C		36 C2	
IXIYUJ-1	1.0000 C		34 C1	
I-2	1.0000 C		39 C1	
IXIYUJ-3	1.0000 C		31 C2	
I-4	1.0000 C		37 C2	
JEDDIF-1	1.0000 C		26 C2	
J-2	1.0000 C		26 C2	
JEVWOX-1	1.0000 C		26 C2	
J-2	1.0000 C		18 C2	
JEVWUD	1.0000 C		36 C2	
LELTUR-1	1.0000 C		23 C1	
L-2	1.0000 C		33 C2	
LUYCOX-1	1.0000 C		25 C1	
L-2	1.0000 C		11 C2	
LUYDEO	0.9953 C	0.0031 HC 0.0015 E	48 C1 56 HC3 57 E8	
MOZYIJ	1.0000 C		14 C1	
NABDAW-2	1.0000 C		18 C2	
NAQZOV-3	1.0000 C		18 C1	
OCIJOA	1.0000 C		19 C2	
PABJIM-1	1.0000 C		34 C1	
P-2	1.0000 C		35 C1	
QASKIF-1	1.0000 C		33 C1	
Q-2	1.0000 C		35 C1	
QILLOM-1	0.9995 C		46 C1	
QILLUS-1	1.0000 C		35 C1	
QILMAZ	1.0000 C		41 C1	
REVQEO	1.0000 C		33 C1	
RUMHEG-1	1.0000 C		13 C2	
R-2	1.0000 C		16 C1	
SEYPAN-1	1.0000 C		12 C2	
S-2	1.0000 C		17 C2	
S-3	1.0000 C		15 C2	
S-4	1.0000 C		22 C1	
S-5	1.0000 C		21 C1	
S-6	1.0000 C		22 C1	
SEYPER-1	1.0000 C		23 C2	
S-2	1.0000 C		13 C1	
TACVOI	1.0000 C		33 C1	
TAFTUQ	1.0000 C		27 C2	
TANXAI-1	1.0000 C		28 C2	
T-2	1.0000 C		26 C2	
TANXEM-1	1.0000 C		24 C2	
T-2	1.0000 C		24 C2	
TOBJEZ	1.0000 C		31 C1	
TOBJID-2	1.0000 C		13 C1	
TOBJID-4	0.9940 C	0.0052 HC	43 C1 51 HC5	
TOZYUC-2	1.0000 C		11 C1	
UJUYUT-1	1.0000 C		42 C1	
U-2	1.0000 C		37 C2	
U-3	1.0000 C		34 C2	
U-4	1.0000 C		37 C1	
ANABAM	1.0000 C		39 C2	
UNABEQ	1.0000 C		34 C2	
UNABOA	1.0000 C		28 C2	
UNACAM-1	1.0000 C		32 C2	
U-2	1.0000 C		36 C2	
U-3	1.0000 C		40 C2	
WUFVEY-1	0.7127 C	0.2326 E 0.0547 HC	51 E2 53 C2 55 HC2	
W-2	1.0000 C		37 C2	
W-3	1.0000 C		35 C2	

B	XELSOX-1	1.0000 C		17 C2	27→11°	
	X-2	1.0000 C		18 C2		
	X-3	1.0000 C		12 C1		
	X-4	1.0000 C		11 C1		
	YAZMAN	1.0000 C		13 C2		
	ZIJZAT	1.0000 C		28 C1		
	ZIQZAA-2	1.0000 C		13 C1		
	ZIQZEE-2	1.0000 C		10 C1		
	ZIQZII-2	1.0000 C		10 C2		
	ZIQZOO-1	1.0000 C		23 C2		
	Z-2	1.0000 C		18 C1		
	ZIQZUU-2	1.0000 C		8 C2		
	JOQQIP ZIQZAA-1	1.0000 B		41 B1		
	ZIQZEE-1	1.0000 B		22 B5		
	ZIQZII-1	1.0000 B		19 B5		
	ZIQZUU-1	1.0000 B		21 B2		
	TB	BAQGUV-4	0.9873 TB	0.0120 B		30 B2
DAGYUF		1.0000 TB		33 TB3 44 B3		
FEJKUB		0.9957 TB	0.0043 B	7 TB1		
MUPBOO		1.0000 TB		27 TB4 43 B4		
NAQZUB-4		0.9994 TB		10 TB4		
TAFTIE		1.0000 TB		35 TB6		
TAFTOK		1.0000 TB		18 TB1		
TOBJOJ-1		1.0000 TB		19 TB4		
T-2		1.0000 TB		22 TB3		
YAZMER		0.8522 TB	0.1478 B	22 TB2		
YAZPAR		1.0000 TB		36 TB3 39 SB3		
YAZPEV		1.0000 TB		7 TB4		
BIGMEJ		0.9418 E	0.0582 HC	15 TB1	28→12°	
CETNIZ		0.8886 E	0.1114 HC	17 E8 29 HC3		
DACHPD		0.9764 E	0.0236 HC	34 E8 40 HC3		
DEPSAS		0.9627 E	0.0371 HC	31 E8 43 HC3		
GOSJED-1		0.9938 E	0.0062 HC	19 E8 32 HC8		
G-2	0.9957 E	0.0043 HC	29 E8 45 HC3, HC8			
G-3	0.9970 E	0.0030 HC	28 E2 45 HC2, HC9			
HAPIPD10	0.8335 E	0.1496 HC	26 E8 44 HC3, HC8			
JESBUF	0.9780 E	0.0166 HC	46 E8 50 HC3 51 C1			
JOSYUL	0.4951 E	0.4913 HC	20 E8 35 HC3 38 SB8			
LADMIM	0.9925 E	0.0075 HC	30 E2 30 HC9 40 SB9			
MOZYEF	0.8524 E	0.1476 HC	19 E8 37 HC3			
NABDAW-1	0.9869 E	0.0130 HC	34 E2 39 HC2			
NADFED	0.9975 E	0.0014 HC	5 E8 32 HC3			
NAQZOV-1	0.9864 E	0.0135 HC	23 E8 44 HC3 44 SB3			
NAQZOV-2	0.99796 E	0.0204 HC	25 E2 38 HC2			
E	OCEPER-1	0.9541 E	0.0457 SB	27 E8 39 HC8		36→15°
	O-2	0.7608 E	0.2381 SB	39 E2 46 SB9		
	PRBXP	0.8726 E	0.0882 HC	40 E8 43 SB8 54 HC8		
	QOVRIC	0.7807 E	0.2193 HC	50 E8 55 HC8 59 C1		
	QOVROI	0.7069 E	0.2931 HC	30 E2 46 HC2		
	QOVRUO	0.9121 E	0.0879 HC	32 E2 50 HC2		
	TOBJID-1	0.9389 E	0.0596 SB	21 E8 30 HC3		
	T-3	0.8469 E	0.1301 SB	33 E2 40 SB9 48 HC9		
	TOZYUC-1	0.6052 E	0.3948 HC	26 E2 33 SB2 38 HC2		
	UCOBAQ	0.5446 E	0.3056 C	36 E8 38 HC3		
	UKADALÇUNAB	0.9874 E	0.0123 SB	48 E2 52 HC2, HC9 53 C2		
	IU	0.9309 E	0.0691 HC	35 E9 47 SB9		
	UNABUG	0.9494 E	0.0506 HC+	31 E2 38 HC9		
	XUVQIU-1	0.9861 E	0.0139 HC	37 E8 45 HC3		
	X-2	0.9860 E	0.0140 HC	14 E2 35 HC2		
	X-3	0.9760 E	0.0240 HC	14 E8 36 HC3		
	X-4	0.9796 E	0.0204	15 E2 32 HC2		
HC	BAQGUV-3	0.9543 HC	0.0457 E	15 E8 37 HC3	34→14°	
	EKAPUB	0.9838 HC	0.0162 E	32 HC6 41 E6		
	HAKQIU	0.9074 HC	0.0926 E	27 HC8 41 E1, E8		
	ILIZUY-1	0.8558 HC	0.1339 E	34 HC2 40 E7		
	I-2	0.7753 HC	0.1842 SB	43 HC2 47 E2 52 SB2		
	ILOBAM-2	0.4814 HC	0.2838 HC	52 HC3 54 SB3 58 E3		
	PEVKEG	0.8112 HC	0.1693 E	42 HC9 43 E2 44 SB9		
	QILLUS-2	0.5142 HC	0.4624 SB	16 HC2 24 E7 31 SB2		
	VIWSUP	0.4466 HC	0.2919 E	53 HC2 53 SB2 59 E2		
	BAQGUV-1	0.9847 SB	0.0153 TB	26 HC8 27 E1 28 SB8		
	DAGFEW	0.4524 SB	0.2928 E	33 SB6 46 TB3		
	HISTPD	0.9618 SB	0.0316 HC	21 SB9 23 E2 24 HC9		
			0.0066 E	22 SB2 34 HC2 39 E2		

HIXXER	0.6834 SB	0.2463 HC	0.0703 E	54 SB9	56 HC9	58 E2
ILOBAM-1	0.9869 SB	0.0123 HC		67 SB2	73 HC2	
KEXMAC	0.9626 SB	0.0314 E	0.0059 B	42 SB3	50 E8	54 B5
NAQZUB-1	0.5837 SB	0.4002 E	0.0159 B	44 SB9	44 E2	52 B2
N-2	0.7369 SB	0.2544 TB	0.0087 B	45 SB2	49 TB2	55 B2
N-3	0.9610 SB	0.0383 E		31 SB6	40 E11	
NIMZAK	0.9912 SB	0.0063 HC	0.0025 E	15 SB9	35 HC9	38 E2
NOLZAR-1	0.9959 SB	0.0028 HC	0.0014 E	15 SB2	37 HC2	39 E7
N-2	0.9209 SB	0.0770 HC	0.0021 E	11 SB2	25 HC2	37 E2
PYDCUB-1	0.9269 SB	0.0731 TB		45 SB4	51 TB1	
P-2	0.8795 SB	0.1201 TB		45 SB4	51 TB1	
QILLOM-2	0.9985 SB			53 SB9		
RIRTER	0.7037 SB	0.2880 HC	0.0083 E	15 SB2	20 HC2	34 E2
WEDWUX-1	0.9969 SB	0.0029 HC		9 SB9	35 HC9	
W-2	0.7061 SB	0.2826 HC	0.0113 E	16 SB9	21 HC9	33 E2
WEDXAE	0.8674 SB	0.1220 E	0.0106 HC	26 SB9	32 E2	39 HC9
XIDDUK-1	0.8056 SB	0.1821 HC	0.0123 E	65 SB3	67 HC3	71 E8
X-2	0.8024 SB	0.1826 HC	0.0150 E	37 SB2	41 HC2	47 E2

**Deformación media global 27→11°**



La conformación más abundante es la *chair* seguida de la *envelope*, con abundancias de 60 y 17%, y una desviación media de 11° y 12°, respectivamente. La desviación media global es 11°.

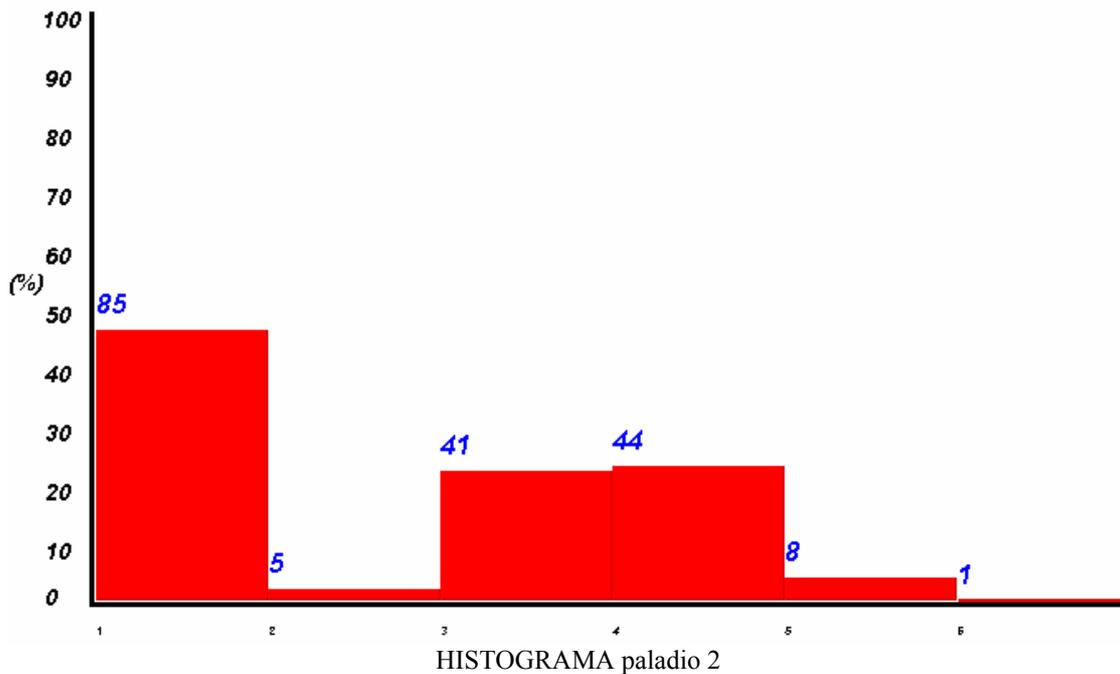
**Paladio [2]**

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media				
C	ACIVAJ	1.0000 C	41 C1	38 → 15°				
	ACIVEN	1.0000 C	32 C1					
	AZIYUD-1	0.9999 C	42 C2					
	AZIYUD-2	0.9328 C	50 C2		53 E2	54 HC2		
	AZIZAK-1	1.0000 C	40 C1					
	AZIZAK-2	1.0000 C	39 C2					
	CAKXER	0.8360 C	0.1132 E		0.0508 SB	52 C1	52 E8	54 HC8
	CEFYER	1.0000 C			18 C1			
	CEFYIV-1	1.0000 C			20 C2			
	DABDAM	1.0000 C			23 C1			

ELOSON-1	0.8468 C	0.1165 E	0.0367 HC	51 C1	51 E8	54 HC8
ELOSON-2	0.9999 C			40 C2		
ELOSUT-1	1.0000 C			39 C2		
ELOSUT-2	0.9971 C	0.0017 E	0.0012 HC	48 C2	57 E2	57 HC2
ELOTII	1.0000 C			29 C2		
FEMSOG	1.0000 C			25 C1		
GULRIU-1	1.0000 C			20 C1		
GULRIU-2	1.0000 C			36 C2		
HAKHAC-1	1.0000 C			43 C1		
HAKHAC-2	1.0000 C			41 C1		
HOQBUE	0.9952 C	0.0039 HC		48 C2	55 HC2	
IDAMIY	0.7671 C	0.1562 E	0.0767 HC	51 E8	52 C1	53 HC8
JERDEQ	1.0000 C			39 C1		
JIHJIT-1	1.0000 C			40 C2		
JIHJIT-2	0.9570 C	0.0378 E	0.0053 HC	54 C2	57 E2	61 HC2
J-3	1.0000 C			36 C1		
J-4	1.0000 C			44 C1		
KADKIK-1	0.9996 C			48 C1		
KADKIK-2	1.0000 C			45 C1		
KAHPOY	1.0000 C			30 C2		
LAQDAI	1.0000 C			30 C1		
LAYKEC	1.0000 C			32 C1		
LEBBAW	1.0000 C			39 C1		
LISCEV	1.0000 C			38 C2		
LISTEM	1.0000 C			38 C2		
LOSDAY	0.9999 C			41 C2		
LOSDEC	1.0000 C			41 C2		
LOWVIC	1.0000 C			44 C1		
MAGDEE-1	0.9994 C			47 C2		
MAGDEE-2	0.9025 C	0.0639 E	0.0336 HC	53 C1	54 E8	56 HC8
MURLIV	1.0000 C			39 C1		
MURLUA-1	1.0000 C			32 C2		
MURLUA-2	1.0000 C			31 C2		
MURLUG	1.0000 C			28 C1		
MUXPEV-1	1.0000 C			40 C2		
MUXPEV-2	1.0000 C			39 C2		
MUMLUC-1	1.0000 C			37 C1		
MUMLUC-2	1.0000 C			37 C2		
N-3	1.0000 C			42 C2		
N-4	1.0000 C			35 C1		
PAVMEF-1	1.0000 C			41 C2		
PAVMEF-2	1.0000 C			43 C1		
PAVMIY-1	1.0000 C			28 C2		
PAVMIY-2	0.9302 C	0.0603 E	0.0095 HC	53 C1	55 E8	59 HC3, HC8
QOCCEQ	1.0000 C			35 C1		
QOCCIU	1.0000 C			31 C2		
QOCDAN	1.0000 C			37 C2		
QUGNIP	1.0000 C			34 C2		
REKSAB	1.0000 C			28 C2		
SAYHIY	1.0000 C			26 C2		
SUDNAG	1.0000 C			32 C2		
TATXUH	1.0000 C			32 C1		
TEKZUE	1.0000 C			34 C1		
TEPXER	0.9991 C			45 C2		
TOHNIN-1	1.0000 C			33 C2		
TOHNIN-2	0.9977 C	0.0015 HC		45 C1	55 HC3	
TOHNOT-1	1.0000 C			41 C2		
UCANUH	0.9999 C			43 C2		
UCUVEU	1.0000 C			34 C1		
UMEDEV	0.9999 C			45 C1		
UNACER	1.0000 C			35 C2		
WOGNOV	1.0000 C			41 C2		
XAFREB	1.0000 C			36 C1		
XAFYEY	1.0000 C			27 C1		
XAFYUZ	1.0000 C			41 C1		
XAFZAG	1.0000 C			36 C1		
XEBPEA-1	1.0000 C			42 C2		
XEBPEA-2	1.0000 C			39 C1		
XILXAR	0.9957 C	0.0040 HC		48 C2	55 HC2	
YADZIM	0.8194 C	0.1219 E	0.0588 HC	57 C2	57 E2	58 HC2
YOSVOR	0.9999 C			43 C1		
YOSVUX	1.0000 C			28 C2		
ZAGCUF	1.0000 C			29 C1		
ZAGDAM	1.0000 C			25 C2		

	ZUFGEM	1.0000 C	16 C2	
B	CASQES DPPDC LEWQAF SOGLAB VAJHEU	0.9950 B 0.0047 TB 0.9970 B 0.0029 TB 0.9995 B 1.0000 B 1.0000 B	38 B3 50 TB3 36 B4 50 TB2 34 B3 31 B5 33 B5	34→14°
TB	BAVRIZ-1 B-2 B-3 BAVROF-1 B-2 B-3 BEVFED-1 B-2 B-3 B-4 DEPWUQ DEPXAX DPPDN10 ELOTAA ELOTOO EMOJAR EMOKEW HOGBUA HUHZUF ILATUK KIHNAQ KIHNAQ01 MADDEB MEKTAY OCIZEF PAQBIS PAQBOY PEYXEX PIBYUU-1 P-2 P-3 PIZZIH QELDIU RONPOZ RUNVUR TILJUT-1 T-2 TIYPAS TOHTOZ WIKCEY ZUQXED	1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9995 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9572 TB 0.0428 SB 0.9975 TB 0.0025 SB 1.0000 TB 0.9918 TB 0.0082 B 0.9991 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9994 TB 0.9941 TB 0.0059 B 0.9981 TB 0.0019 B 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9998 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9966 TB 0.0034 B 0.9740 TB 0.0260 B 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9987 TB 0.0013 B 0.9974 TB 0.0026 B 0.9999 TB 0.9996 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9967 TB 0.0033 B 1.0000 TB 0.9942 TB 0.0058 B 0.9697 TB 0.0173 SB 0.0130 B	21 TB3 28 TB2 18 TB3 19 TB2 25 TB3 30 TB2 27 TB6 38 TB3 44 SB3 33 TB6 46 SB9 28 TB3 51 TB3 59 B3 49 TB6 8 TB4 10 TB4 18 TB4 54 TB3 53 TB3 62 B3 52 TB3 63 B3 26 TB2 11 TB1 16 TB4 13 TB4 19 TB4 11 TB1 8 TB4 49 TB3 60 B3 54 TB3 60 B3 8 TB1 18 TB5 25 TB6 22 TB5 55 TB3 64 B3 51 TB6 61 B6 46 TB6 45 TB6 18 TB4 11 TB1 51 TB6 61 B6 12 TB1 54 TB6 63 B6 48 TB5 54 SB8 56 B1	30→13°
E	AGADOB AHAJEY AHAJOI AMACAS BAMQIP BAMQOV CEFYIV-2 CULLEA ELOTEE HUNJAB HUNJIB JOZWIE KONSAH-1 K-2 LISCAR MAGDII MEKTEC-1 M-2 MIGSEA PAJTEZ-1 P-2 PAKQIB QEJCIS-2 QULMEP SEVVUL SEVWAS SOBWOV-1	0.9575 E 0.0421 HC 0.8641 E 0.1359 HC 0.9625 E 0.0375 HC 0.9852 E 0.0148 HC 0.9804 E 0.0110 SB 0.0087 HC 0.9769 E 0.0231 HC 0.4865 E 0.4637 HC 0.0498 C 0.9959 E 0.0040 HC 0.9673 E 0.0327 HC 0.9790 E 0.0210 HC 0.9439 E 0.0561 HC 0.9944 E 0.0056 HC 0.9951 E 0.0049 HC 0.9960 E 0.0040 HC 0.9942 E 0.0058 HC 0.9664 E 0.0336 HC 0.9908 E 0.0092 HC 0.0088 E 0.0012 HC 0.9144 E 0.0846 HC 0.0010 C 0.6366 E 0.1877 HC 0.1747 C 0.7366 E 0.2596 HC 0.0028 C 0.4707 E 0.4467 C 0.0827 HC 0.7556 E 0.2444 HC 0.7693 E 0.2305 HC 0.9813 E 0.0187 HC 0.8356 E 0.1603 HC 0.0041 SB 0.9946 E 0.0047 HC	46 E8 54 HC3, HC8 29 E2 35 HC2 27 E2 42 HC2 22 E2 38 HC2 34 E2 46 SB2 46 HC2 18 E2 33 HC2 48 E8 48 HC3 55 C1 31 E2 45 HC2 40 E8 49 HC3, HC8 24 E8 37 HC3 31 E2 40 HC2 25 E2 42 HC9 24 E8 41 HC8 28 E2 44 HC2 21 E8 39 HC3 42 E8 50 HC8 58 E2 65 HC2 55 E8 66 HC3 44 E2 52 HC2 61 C2 51 E2 53 HC9 56 C2 45 E8 47 HC3 59 C1 50 E2 54 C2 55 HC2 30 E2 34 HC2 41 E2 51 HC2 27 E8 39 HC3 35 E2 39 HC2 48 SB2 32 E2 46 HC9	36→15°

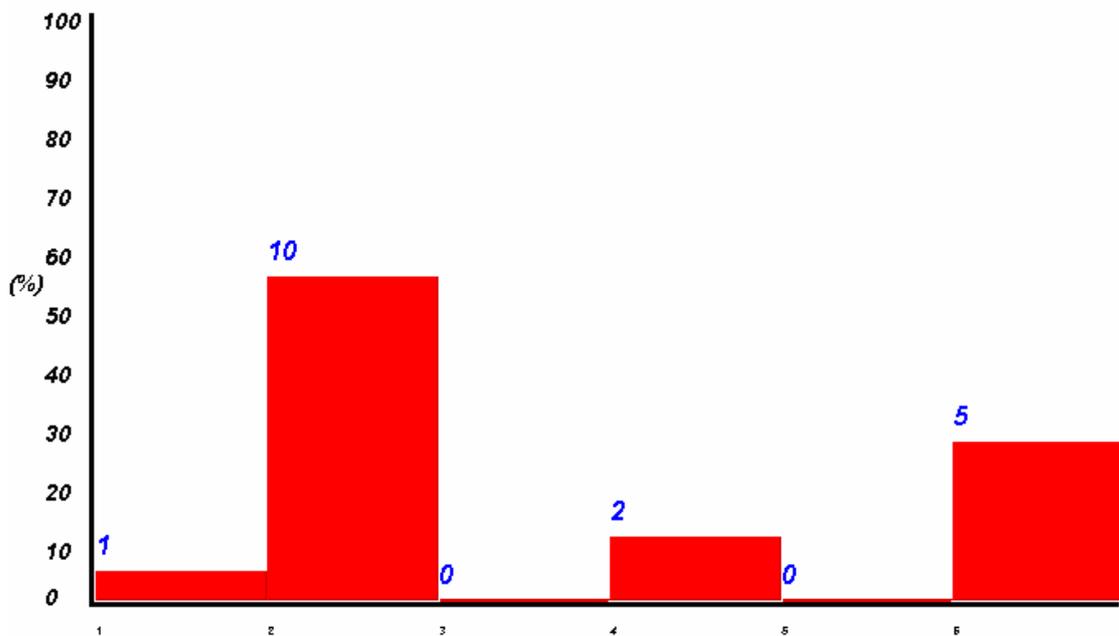
	S-2	0.9965 E 0.0035 HC	30 E8 46 HC8	
	TAHQID	0.9636 E 0.0364 HC	23 E2 35 HC2	
	TAHSEB	0.9003 E 0.0997 HC	33 E8 40 HC3	
	TAWTOA-1	0.7212 E 0.2787 HC	41 E8 43 HC8	
	T-2	0.8091 E 0.1632 HC 0.0277 C	47 E2 51 HC2 57 C2	
	TOHNOT-2	0.8504 E 0.1108 HC 0.0388 C	48 E8 53 HC8 57 C1	
	VOTFUF	0.6128 E 0.2635 HC 0.1237 C	54 E2 56 HC2 60 C2	
	WAJSUW	0.8534 E 0.1466 HC	42 E8 46 HC8	
	WEWMIU-1	0.9958 E 0.0042 HC	22 E2 41 HC2	
	W-2	0.8136 E 0.1864 HC	32 E8 37 HC3	
	WEWMOA-1	0.9987 E 0.0011 HC	24 E8 45 HC3	
	WIWSEA	0.9019 E 0.0980 HC	40 E2 46 HC9	
	XEVBEQ	0.9849 E 0.0151 HC	35 E2 47 HC2	
	XEXZOQ	0.5330 E 0.2780 C 0.1890 HC	51 E2 53 HC9 56 C2	
	YADFAL	0.7691 E 0.2309 HC	36 E8 39 HC8	
	YADFEP	0.8717 E 0.1082 HC	28 E2 35 HC9	
	YIBMUR	0.9960 E 0.0040 HC	33 E8 47 HC3	
HC	CULLIE	0.7906 HC 0.2092 E	37 HC9 40 E2	33→14°
	IPOLUU	0.6287 HC 0.3711 E	38 HC3 39 E8	
	MAGDAA	0.5675 HC 0.4198 E 0.0127 SB	30 HC3 31 E8 41 SB3	
	PAJTOJ	0.9071 HC 0.0929 E	35 HC3 41 E8	
	REJCIS-1	0.5099 HC 0.4901 E	32 HC8 32 E8	
	WEWMOA-2	0.7590 HC 0.2374 E 0.0036 SB	18 HC8 24 E8 37 SB8	
	XULXUX	0.8214 HC 0.1786 E	37 HC9 41 E2	
	YEWYIJ	0.7618 HC 0.2374 E	40 HC8 43 E8	
SB	YEYBIN	0.6834 SB 0.3080 HC 0.0146 E	21 SB3 24 HC3 35 E8	21→9°
<b>Deformación global 35 → 14°</b>				



La conformación más abundante es la *chair* seguida de la *envelope* con una abundancia de 46 y 24% respectivamente, y con una deformación media de 15° para ambas. La desviación media global es 14°.

**Paladio [3]**

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	VAGTEC	0.9764 C 0.0210 E 0.0025 HC	55 C1 58 E8 62 HC3	55 → 23°
B	HENGEN	0.9686 B 0.0313 SB	42 B5 49 SB8	40 → 17°
	INIWUX	0.8287 B 0.1660 SB 0.0053 E	44 B2 46 SB9 53 E2	
	INIXAE	0.9982 B 0.0018 SB	39 B5 53 SB3, SB8	
	JEVWUD	0.5720 B 0.3115 SB 0.1164 E	47 B5 48 SB3 49 E8	
	KATFIV	0.9999 B	35 B2	
	KEQPAY	0.8403 B 0.1574 SB 0.0022 TB	42 B2 44 SB9 54 TB6	
	LEGKAT	0.7657 B 0.2115 TB 0.0229 SB	46 B5 49 TB3 52 SB3	
	QAFMUG	1.0000 B	28 B2	
	QEKGIX	0.9968 B 0.0030 SB	40 B2 51 SB9	
E	YAYZUT	0.9998 B	39 B5	36 → 15°
	EHUDUG	0.9760 E 0.0238 HC	51 E8 58 HC3	
SB	VAGRUQ	0.9950 E 0.0050 HC	20 E2 39 HC9	38 → 16°
	IDULAV	0.8879 SB 0.0691 B 0.0430 E	43 SB3 49 E8 50 B5	
	INIXEI-1	0.9090 SB 0.0848 E 0.0060 B	40 SB2 45 E2 52 B2	
	INIXEI-2	0.7578 SB 0.1807 B 0.0614E	44 SB8 49 E8 49 B5	
	QAFMOA	0.9677 SB 0.315 E	29 SB8 39 E8	
	RITLOV	0.9990 SB	33 SB9	
<b>Deformación global 40 → 17°</b>				

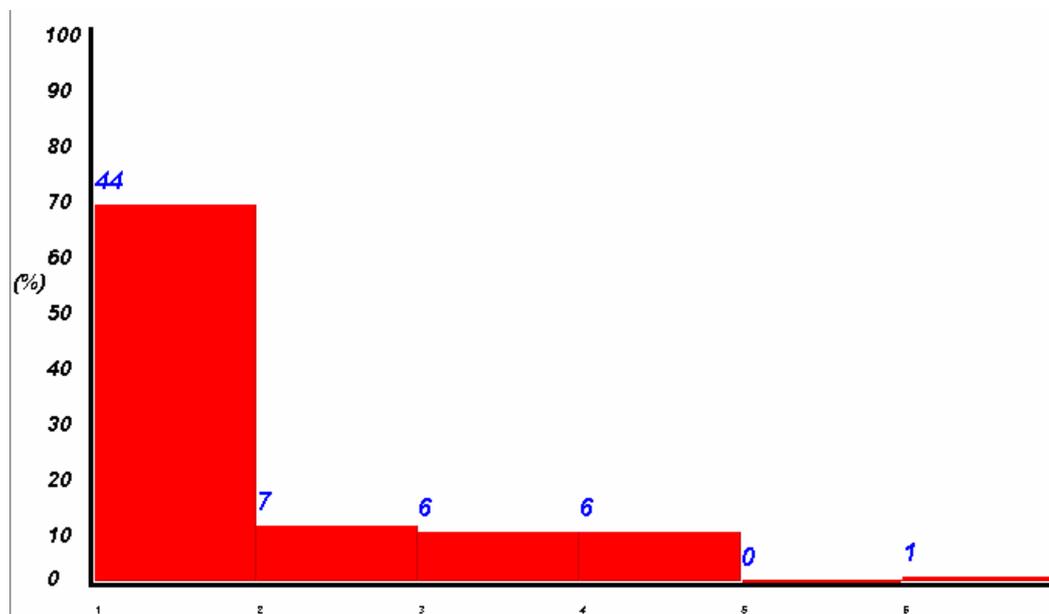


La conformación más abundante es la *boat* con el 56% y una deformación media de 17°, seguida de la *screw-boat* con el 28% y una deformación similar. La deformación media global coincide, lógicamente, con las de las dos anteriores, muy mayoritarias, 17°.

Paladio [4]

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	BANMIN-2	1.0000 C	13 C2	32 → 13°
	FAJREN	1.0000 C	44 C2	
	FAJRIR	1.0000 C	45 C1	
	FAJRUD-1	1.0000 C	50 C1	
	FAJRUD-2	1.0000 C	49 C2	
	FAJSAK-1	1.0000 C	49 C1	
	FAJSAK-2	1.0000 C	45 C2	
	FIYFIC-1	1.0000 C	31 C2	
	FIYFIC-2	1.0000 C	41 C2	
	IWALAT-1	0.9988 C	45 C1	
	IWALAT-2	0.9956 C 0.0031 E 0.0013 HC	47 C1 55 E8 58 HC3	
	IWALAT-3	1.0000 C	39 C1	
	IWALAT-4	1.0000 C	37 C1	
	KEXYIW-1	1.0000 C	27 C2	
	KEXYIW-2	1.0000 C	35 C1	
	KULNEK-1	1.0000 C	44 C2	
	KULNEK-2	1.0000 C	32 C1	
	MESFAR-1	1.0000 C	35 C2	
	MESFAR-2	1.0000 C	25 C1	
	MESFEV	1.0000 C	22 C1	
	MESFIZ-1	1.0000 C	26 C1	
	NIDQUM	1.0000 C	24 C1	
	NIZQOC	1.0000 C	24 C2	
	NIFQUI-1	1.0000 C	33 C1	
	NIFQUI-2	1.0000 C	24 C2	
	NIZRAP-1	1.0000 C	32 C2	
	NIZRAP-2	1.0000 C	31 C1	
	NIZRET	1.0000 C	24 C2	
	POBQOM-1	1.0000 C	46 C2	
	POBQOM-2	1.0000 C	26 C1	
	QOCCOA-2	1.0000 C	19 C1	
	QOCDAN-1	1.0000 C	24 C1	
	ROCPEE	1.0000 C	24 C1	
	TATKIJ-1	1.0000 C	27 C1	
	TATKIJ-2	1.0000 C	25 C2	
	TOFNIL	1.0000 C	28 C2	
	TOGHOMO1-1	1.0000 C	37 C1	
	TOGHOMO1-2	1.0000 C	25 C2	
	TOGHOMO1-3	1.0000 C	28 C2	
	TOGHOMO1-4	1.0000 C	37 C1	
	UHANUM-1	1.0000 C	28 C1	
UHANUM-2	1.0000 C	37 C2		
VIVXUT-1	1.0000 C	10 C2		
VIVYAA-1	1.0000 C	15 C2		
B	BANMIN-1	1.0000 B	16 B2	28 → 12°
	ECAREF-1	0.9998 B	42 B2	
	ECAREF-2	0.9970 B 0.0028 SB	49 B2 59 SB2	
	QOCCOA-1	1.0000 B	25 B5	
	QOCDAN-2	1.0000 B	16 B5	
	VIVXUT-2	1.0000 B	16 B2	
	VIVYAA-2	1.0000 B	16 B2	
TB	IYUZUX	1.0000 TB	18 TB4	26 → 10°
	MESFIZ-2	1.0000 TB	21 TB1	
	TATKEF-1	0.9956 TB 0.0044 B	37 TB5 49 B5	
	TATKEF-2	0.9397 TB 0.0603 B	37 TB5 44 B5	
	TATKOP	1.0000 TB	21 TB1	
	TEKZUE	1.0000 TB	20 TB1	
	KORSIT	0.9969 E 0.0031 HC	32 E2 48 HC9	
	LAJYEB-1	0.9943 E 0.0057 HC	26 E8 42 HC3	
	LAJYEB-2	0.9600 E 0.0400 HC	37 E2 45 HC9	
	QOCCOA-3	0.4469 E 0.2863 HC 0.2669 C	47 E2 49 HC9 52 C2	
	QOCCOA-4	0.6444 E 0.2196 B 0.1359 SB	51 E2 54 SB9 55 B2	
ZUHCOU	0.9981 E 0.0019 HC	30 E8 46 HC3		
E	KORSIT	0.9969 E 0.0031 HC	32 E2 48 HC9	37 → 15°
	LAJYEB-1	0.9943 E 0.0057 HC	26 E8 42 HC3	
	LAJYEB-2	0.9600 E 0.0400 HC	37 E2 45 HC9	
	QOCCOA-3	0.4469 E 0.2863 HC 0.2669 C	47 E2 49 HC9 52 C2	

	QOCCOA-4 ZUHCOU	0.6444 E 0.2196 B 0.1359 SB 0.9981 E 0.0019 HC	51 E2 54 SB9 55 B2 30 E8 46 HC3	
SB	PAKBOS	0.6387 SB 0.3613 TB	45 SB8 48TB5	45 → 19°
<b>Deformación global 31 → 13°</b>				



HISTOGRAMA paladio 4

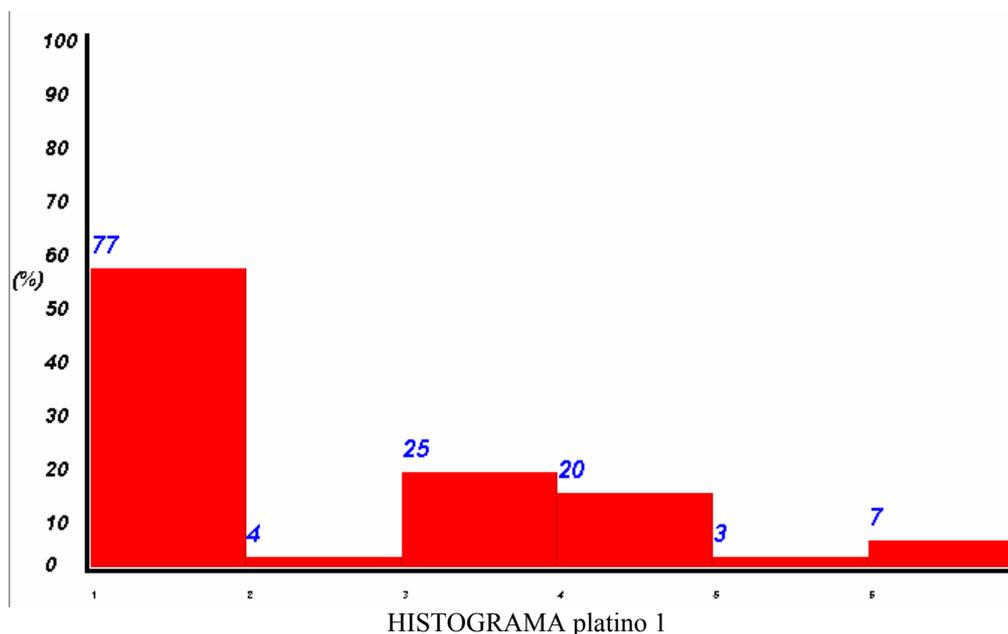
La conformación mayoritaria es la *chair* con un 69% y una desviación media de 13°, seguida muy de lejos de la *boat*. La conformación media global es también 13°.

**Platino [1]**

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	CAFWIQ	1.000 C	33 C1	32 → 14°
	CAMFAX	1.000 C	25 C1	
	CARSAP	1.000 C	29 C1	
	CARSET	1.000 C	31 C1	
	CARSIX	1.000 C	32 C1	
	CENPIV	1.000 C	22 C1	
	DAHCIY	1.000 C	12 C2	
	DANQAK	1.000 C	31 C1	
	DOGZII	1.000 C	34 C2	
	EMIFIP-2	1.000 C	12 C2	
	FAJWOC	1.000 C	40 C1	
	FENYAY	1.000 C	28 C1	
	FENZAZ-1	1.000 C	46 C2	
	FENZAZ-2	1.000 C	32 C2	
	FEYXOW-1	1.000 C	23 C1	
	FEYXOW-2	1.000 C	38 C2	
	FUJCOC	1.000 C	40 C1	
	FUYBIK	1.000 C	29 C2	
	FUYDIM	0.8754 C 0.1017 E 0.0229 HC	52 C2 53 E2 56 HC2	
	GADZEQ	1.000 C	11 C2	
	GEWGEU-2	1.000 C	43 C1	
	GEWGIY	1.000 C	28 C2	
	GICKUY	1.000 C	19 C1	
	GISJOH	1.000 C	30 C1	
	GOJEA-1	1.000 C	29 C2	
	GOJEA-2	1.000 C	26 C1	
	HABZIV	1.000 C	40 C1	
	HOUTER	1.000 C	28 C2	



	IHCOR ZOPJET-2 ZOPJET-3 ZOPJET-4	0.9951 TB 0.0049 SB 0.9778 TB 0.0022 SB 1.0000 TB 1.0000 TB	38 TB3 49 SB3 41 TB5 48 SB8 24 TB6 17 TB2	
E	BERDAE-1 BERDAE-2 EMIFIP-1 FAMMIP GALYAT HADCIF-1 HADCIF-6 HADCIF-9 IHCUX JITVIR MEQGEV MLAMPT NAYFOJ NIHREB PAWUIU PAWWUG VAQVIT WUCLEL XIGBEU YABJAN	1.0000 E 1.0000 E 0.8904 E 0.1096 HC 0.7605 E 0.2397 HC 0.9741 E 0.0256 HC 0.9756 E 0.0244 HC 0.8674 E 0.1325 HC 0.9561 E 0.0439 HC 0.8197 E 0.1803 HC 0.8162 E 0.1106 HC 0.0732 SB 0.9569 E 0.3333 HC 0.0098 C 0.9897 E 0.0103 HC 0.9494 E 0.0506 HC 0.9695 E 0.0305 HC 0.9683 E 0.0317 HC 0.9616 E 0.0384 HC 0.9661 E 0.0336 HC 0.9894 E 0.0106 HC 0.7154 E 0.2788 HC 0.0058 C 0.6378 E 0.2209 C 0.1413 HC	77 E7 77 E7 37 E8 42 HC8 42 E8 45 HC8 53 E8 60 HC3 37 E8 47 HC8 41 E8 46 HC3 40 E8 47 HC3 32 E8 37 HC3 18 E8 27 HC3 28 SB3 53 E8 59 HC3 64 C1 14 E8 36 HC3, HC8 39 E8 47 HC3, HC8 41 E8 50 HC3, HC8 21 E8 34 HC8 26 E2 37 HC2 16 E2 30 HC2 26 E8 42 HC3, HC8 44 E8 47 HC8 57 C1 49 E8 52 HC3 54 C1	39→15°
HC	LACQOW PAWWOA SUTSUV	0.7096 HC 0.2904 E 0.6432 HC 0.3123 E 0.0445 SB 0.8281 HC 0.1719 E	34 HC9 36 E2 33 HC3 35 E8 40 SB3 29 HC9 34 E2	32→14°
SB	CARSETO1-2 FARYUS GEWGEU-1 LORDEB-1 LORDEB-2 NOTZOL XUKWUV	0.7165 SB 0.2835 TB 0.9643 SB 0.0343 E 0.0015 HC 0.9758 SB 0.0193 HC 0.0049 E 0.8796 SB 0.1180 HC 0.0025 E 0.9984 SB 0.0016 HC 0.9766 SB 0.0203 HC 0.0031 E 0.9907 SB 0.0084 HC	48 SB1, SB4 50 TB1 32 SB3 41 E8 48 HC3 50 SB3 58 HC3 60 E8 13 SB8 24 HC8 38 E8 10 SB8 37 HC8 22 SB9 36 HC9 41 E9 19 SB3 36 HC3	28→12°
<b>Deformación global 31 → 13°</b>				



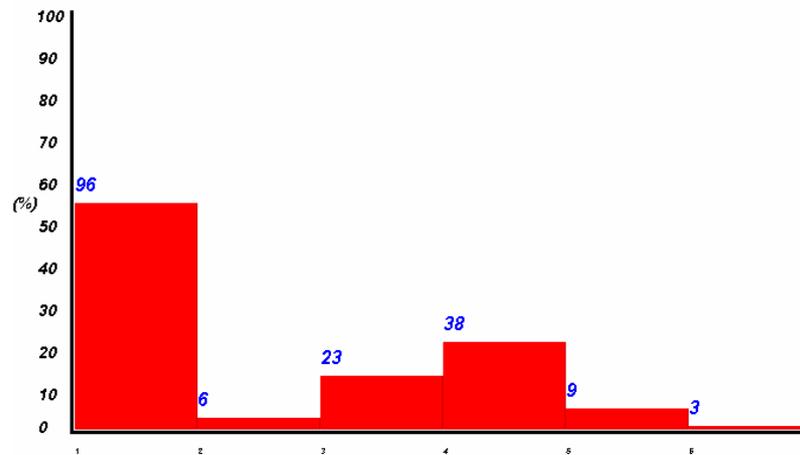
Las conformaciones más abundantes son la *chair* y la *twist-boat* con abundancias de 57 y 18% y unas desviaciones medias de 14 y 10°, respectivamente. La desviación media global es 13°.

## Platino [2]

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	BEVDIQ-2	1.0000 C	37C1	40 → 17°
	BOPPEB20-1	1.0000 C	29 C1	
	CIBDAS10	1.0000 C	27 C1	
	CUVBAW	1.0000 C	23 C2	
	DAFMAY	0.9317 C 0.0490 HC 0.0193 E		
	DEXBIS	1.0000 C	31 C2	
	DEXBOY-1	1.0000 C	25 C1	
	EKOWUW-1	0.9562 C 0.0287 E 0.0151 HC	56 HC2 51 C2 54 E2	
	EKOWUW-2	0.9999 C	45 C1	
	EYESOQ-1	0.9996 C	45 C1	
	EYESOQ-2	1.0000 C	45 C1	
	EZIQUZ-1	1.0000 C	32 C1	
	EZIQUZ-2	1.0000 C	32 C1	
	EZIQUZ-3	1.0000 C	38 C1	
	EZIQUZ-4	1.0000 C	24 C2	
	FAQYAX	1.0000 C	28 C1	
	FEGJUX-1	0.9807 C 0.0167 E 0.0026 HC	53 C2 57 E2 61 HC2	
	FEGKAE	1.0000 C	36 C1	
	FESQOK-1	1.0000 C	42 C1	
	FESQOK-2	1.0000 C	43 C2	
	FOPZIT	1.0000 C	25 C2	
	GAVFAK01	0.7382 C 0.1804 E 0.0814 HC	56 C2, E2 57 HC2	
	GAVZEI	0.9960 C 0.0028 E 0.0012 HC	49 C2 56 E2 58 HC2	
	GOMVUZ	1.0000 C	43 C2	
	HAIWYI	0.9967 C 0.0018 HC 0.0016 E	48 C2 57 HC9, E2	
	HEJSIY-1	1.0000 C	22 C1	
	HEJSIY-2	0.9937 C 0.0050 E 0.0013 HC	50 C1 56 E8 59 HC3	
	HOLGUK	0.9998 C	43 C2	
	HOLHAR	1.0000 C	29 C1	
	IFAMOR	1.0000 C	39 C1	
	IQUCEC-1	0.9980 C 0.0015 HC	48 C2 57 HC9	
	IQUCEC-2	0.9979 C 0.0020 HC	46 C1 55 HC3	
	JEWHOI-1	0.9624 C 0.0318 E 0.0058 HC	52 C1 55 E8 59 HC3, HC8	
	JEWHOI-2	1.0000 C	46 C1	
	JOLZAL	0.9987 C	47 C2	
	KECDOM	0.9600 C 0.239 HC 0.0161 E	53 C2 57 HC2 58 E2	
	KEXTIR	1.0000 C	11 C1	
	KUSSOG	0.9999 C	51 C2	
	LACXOD-1	1.0000 C	38 C1	
	LACXOD-2	0.9999 C	39 C1	
	LALNOB-1	1.0000 C	45 C1	
	LALYED	0.7415 C 0.1715 E 0.0870 HC	54 C1, E8 55 HC3	
	LALYIH	0.9991 C	46 C2	
	LALYON	1.0000 C	35C1	
	LEBBIE	1.0000 C	41 C1	
	LEWGOJ	0.9735 C 0.0222 E 0.0042 HC	52 C2 55 E2 59 HC2	
	LOTMEM	1.0000 C	27 C2	
	LOTMIQ-1	1.0000 C	44 C1	
	LOTMIQ-2	1.0000 C	40 C2	
	MEDPAM	1.0000 C	39 C2	
	MPPRPT20-1	0.8574 C 0.789 HC 0.0636 E	56 C1 57 HC3 58 E8	
	MPPRPT20-2	0.7773 C 0.1631 E 0.0596 HC	56 C1 56 E8 58 HC3	
	NELTAA	1.0000 C	29 C1	
	OCUXIU-2	1.0000 C	36 C2	
	OMALOD	1.0000 C	54 C1	
	OMAMAQ	1.0000 C	38 C1	
PACCEC-1	1.0000 C	43 C1		
PACCEC-2	1.0000 C	41 C1		
PITFED-1	1.0000 C	39 C2		
PITFED-2	1.0000 C	44 C2		
PITFUT-1	0.9569 C 0.0423 HC	53 C2 55 HC2		
PITFUT-2	0.6925 C 0.2545 HC 0.0530 E	50 HC2 51 C2 53 E2		
POBWAE	1.0000 C	43 C2		
PONLUZ	1.0000 C	43 C2		
PPETPT10-1	0.8174 C 0.1072 E 0.0753 HC	48 C2 49 E2 51 HC2, HC9		
PPETPT10-2	0.9900 C 0.0063 HC 0.0037 E	46 C1 52 HC8 53 E8		
QEXMAH-1	1.0000 C	32 C2		
QEXMAH-2	1.0000 C	25 C2		
RALRIF	1.0000 C	31 C2		
RALROL-1	1.0000 C	40 C2		

	RALROL-2 RALRUR-1 RALRUR-2 RALSAY-1 RALSAY-2 REKSEF RINJED SAPZEP SEBQEW-1 SEBQEW-2 SEWFEG-1 SIWNAN TIJRUZ UFOQOU-1 UFOQOU-2 UFOQUB UFOREM-1 UFOREM-2 XAFXUY XAFYAF XAVMOX XIDKOL YAXJOX ZAGCIT-1 ZAGCIT-2 ZIQQIZ	0.9999 C 1.0000 C 0.9994 C 1.0000 C 0.9995 C 0.9997 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9999 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C 0.9640 C 0.0253 E 0.0108 HC 1.0000 C 1.0000 C 1.0000 C	44 C2 27 C2 45 C2 41 C2 40 C2 24 C2 40 C2 40 C2 36 C1 33 C2 45 C1 42 C1 33 C2 48 C2 46 C1 34 C2 26 C1 45 C1 43 C2 43 C2 39 C1 43 C1 50 C1 53 E8 55 HC3 41 C1 39 C1 42 C2	
B	FONKOI HAYRQO HOLGOK THOSPT-1 UGUNAL WIXSUR	0.9991 C 1.0000 B 0.9489 B 0.0476 TB 0.0035 SB 0.9999 B 0.9739 B 0.0254 TB 1.0000 B	33 B3 50 B6 42 B4 48 TB2 52 SB2 20 B5 39 B1 47 TB5 56 B3	40 → 17°
TB	BEVDIQ-3 BUSLEG-1 BUSLEG-2 BUSLEG-3 CAQXEY HUGQOP LEZSIS-1 LEZSIS-2 PODCUG PUJJIN-1 PUJJIN-2 THOSPT-3 VEMWIU-2 VEMWOA-2 VEMWOA-3 WIJZUK-1 WIJZUK-2 WIKDID-1 WIXQID-2 YUKYOS-1 YUKYOS-2 YUKYOS-3 ZUXPIR-2	0.9998 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9725 TB 0.0275 SB 0.9997 TB 0.9997 TB 0.9939 TB 0.0061 B 0.8577 TB 0.1423 B 0.9408 TB 0.0592 B 1.0000 TB 1.0000 TB 0.9989 TB 0.0011 B 0.9938 TB 0.0062 B 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB 1.0000 TB	24 TB1 22 TB3 29 TB2 14 TB3 9 TB1 10 TB1 10 TB1 21 TB1 40 TB6 47 SB9 25 TB3 25 TB3 26 TB5 41 B5 32 TB1 37 B6 29 TB1 38 B6 9 TB1 49 TB3 49 TB3 61 B3 54 TB3 32 B3 10 TB4 19 TB2 23 TB3 21 TB2 12 TB1	24 → 10°
E	AHAJIC BATKOX BPHPPT-1 BPPRPT-3 BPPRPT-4 DEXBEO-1 DEXBEO-2 DEXBOY-2 FEGJUX—2 HAJWOE JOZQOE-2 KAMDOS KILKOF KILKOF10-1 KILKOF10-2 KITNUC KUKVUH LALNOB-2	0.8955 E 0.1045 HC 0.9556 E 0.444 HC 0.9930 E 0.0070 HC 0.9200 E 0.7795 HC 0.9880 E 0.0120 HC 0.9824 E 0.0176 HC 0.9973 E 0.0027 HC 0.8582 E 0.0800 HC 0.0618 C 0.9474 E 0.0526 HC 0.9467 E 0.0527 HC 0.9794 E 0.0206 HC 0.7327 E 0.1867 C 0.0805 HC 0.9867 E 0.0133 HC 0.9946 E 0.0054 HC 0.9882 E 0.0118 HC 0.9958 E 0.0042 HC 0.9964 E 0.0036 HC 0.9587 E 0.0413 HC	30 E2 36 HC2 34 E8 42 HC8 24 E8 39 HC8 12 E2 25 HC2 28 E2 41 HC9 29 E8 42 HC3, HC8 20 E2 42 HC2, HC9 50 E8 55 HC8 56 HC3 40 E8 47 HC8 46 E8 53 HC3, HC8 28 E8 40 HC3 51 E2 56 HC2 57 C2 21 E8 36 HC8 27 E8 44 HC8 20 E2 36 HC9 27 E8 43 HC3 20 E2 41 HC9 43 E8 50 HC3	31 → 13°

	LIBDUV	0.9808 E	0.0192 HC		34 E8	45 HC8	
	NAJQOE	0.8966 E	0.1034 HC		37 E2	42 HC9	
	NAJQUK	0.9663 E	0.0336 HC		9 E2	29 HC9	
	NEWCOH	0.9004 E	0.0996 HC		32 E2	39 HC9	
	NUGCOH	0.9689 E	0.0311 HC		40 E8	49 HC3, HC8	
	OCUXIU-1	0.7556 E	0.1840 HC	0.0605 C	50 E8	53 HC3	58 C1, HC8
	PUPWIG-1	0.9296 E	0.0703 HC		20 E2	30 HC9	
	PUPWIG-2	0.9961 E	0.0039 HC		22 E2	41 HC9	
	QULMIT	0.7517 E	0.2482 HC		38 E2	41 HC9	
	QULMOZ	0.9461 E	0.0539 HC				
	QULMUF	0.9225 E	0.0775 HC		32 E2	40 HC9	
	SEWIIK	0.9272 E	0.0663 HC	0.0065 C	48 E8	54 HC8	56 HC3
	TEPFEZ	0.9907 E	0.0093 HC		17 HC9	36 HC8	
	TEPFID-2	0.6003 E	0.3934 HC		28 E8	30 HC8	
	VIPMUC	0.8624 E	0.1375 HC		36 E2	40 HC2	
	XEKJEC	0.9324 E	0.0676 HC		36 E8	43 HC3	
	XEKJIG	0.9695 E	0.0305 HC		23 E8	36 HC3	
	XIDKUR	0.7167 E	0.2815 HC	0.0018 SB	30 E2	33 HC2	46 SB2
	XOTSAA	0.9351 E	0.0648 HC		45 E2	51 HC3	
	YOMQEW	0.9943 E	0.0057 HC		30 E8	47 HC8	
HC	BEVDIQ-1	0.7673 HC	0.1696 E	0.031 C	51 HC3	54 E8	59 C1
	BOPPEB20-2	4641 HC	0.4078 C	0.1281 E	50 HC8	53 E8	54 C1
	GERHAN	0.6328 HC	0,3672 E		39 HC9	41 E2	
	JOZQOE-1	0.7495 HC	0.2379 E	0.0125 SB	36 HC2	39 E2	46 SB2
	KUKWAO	0.7628 HC	0.2278 E	0.0094 SB	30 HC3	34 E8	42 SB3
	SEWFEG-2	0.9580 HC	0.0287 E	0.0133 C	43 HC9	51 E2	55 E9
	TEPFID-1	0.7953 HC	0.1708 E	0.0338 SB	17 HC9	24 E2	30 SB9
	VEMWIU-1	0.9499 HC	0.0501 E		38 HC2	45 E7	
VEMWOA-1	0.9171 HC	0.0829 E		36 HC3	42 E3		
SB	BPPRPT-2	0.5582 SB	0.3427 HC	0.0992 E	51 SB8	52 HC8	55 HC3
	THOSPT-2	0.5178 SB	0.3024 TB	0.1798 B	50 SB9	53 TB6	54 B2
	ZUXPIR-1	0.5762 SB	0.4163 HC	0.0075 E	33 SB3	34 HC3	45 E8
<b>Deformación global 36 → 15°</b>							



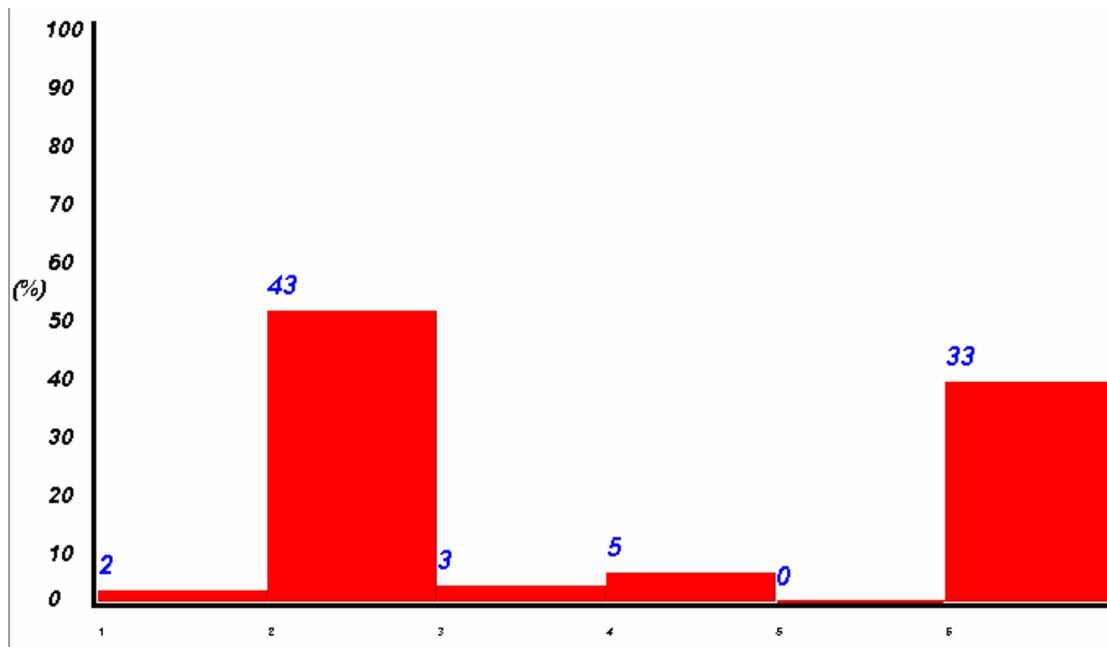
HISTOGRAMA platino 2

La conformación más abundante es la *chair* seguida de la *twist-boat*, con unas abundancias de 55 y 13% y desviaciones medias de 17 y 10°, respectivamente. La desviación media global es de 15°.

## Platino [3]

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
	HIRYOW NEBSOC	1.000 C 1.000 C	35 C1 25 C2	30 → 12°
B	AHEHIE ALICON AMCBPT BERBAL-2 BUTJIJ CAGDUJ CUHKIZ DEGTED GADZEQ GOZJEK HAGPIP-1 HAGPIP-2 HISGUL JAJZEA-1 JAJZEA-2 KANLOB KEJNIS LALNAN LIYLUA-1 LIYLUA-2 LORCOK MILMID MLAMPT NAVBUJ NUCVEM PEXTOB-1 PEXTOB-2 POXJOB QASKEB QUBFOI REJZIA TEVSAP VAYXEY WIGMEE WUCLEL XIBRAC XUNBOX ZASVOE ZURLAZ-1 ZURLAZ-2 ZURLED-1 ZURLED-2 ZUZTIX	0.9964 B 0.0036 SB 1.000 B 0.9996 B 0.9997 B 0.9899 B 0.0099 SB 1.000 B 0.9997 B 0.96333 B 0.0364 SB 0.9996 B 0.8810 B 0.1190 TB 1.000 B 1.000 B 0.9964 B 0.0029 SB 0.7793 B 0.1904 TB 0.0303 SB 0.9859 B 0.0139 TB 0.9866 B 0.0134 TB 1.000 B 0.9891 B 0.0069 TB 0.0040 SB 0.9965 B 0.0034 SB 0.9886 B 0.0111 SB 0.9988 B 0.9997 B 1.0000 B 0.9759 B 0.0189 SB 0.0052 TB 0.9736 B 0.0258 SB 1.0000 B 1.0000 B 1.0000 B 0.9996 B 0.9325 B 0.0648 SB 0.0027 E 0.9994 B 1.0000 B 0.5182 B 0.4694 SB 0.0125 TB 0.9999 B 1.0000 B 0.8379 B 0.1612 SB 0.9998 B 0.9846 B 0.0142 SB 0.0012 E 0.9999 B 0.9999 B 0.9993 B 0.9998 B 1.0000 B	39 B2 51 SB2 26 B2 39 B5 32 B2 44 B5 52 SB3 31 B5 34 B5 41 B2 47 SB2 36 B2 36 B3 41 TB3 31 B5 30 B2 37 B2 49 SB2 40 B5 44 TB5 46 SB8 35 B2 46 TB6 31 B5 43 TB5 33 B2 37 B5 49 TB5 49 SB8 40 B5 52 SB3 39 B5 48 SB8 35 B5 33 B5 27 B2 48 B2 54 SB2 58 TB2 42 B5 48 SB3 28 B5 29 B5 25 B5 38 B2 43 B2 53 SB2 54 E2 37 B2 27 B5 43 SB3 44 B5 52 TB3 34 B2 34 B2 42 B5 44 SB8 33 B5 42B2 55 SB2 55 E2 33 B2 39 B2 31 B2 29 B2 36 B5	36 → 15°
TB	BERBAL-1 KASROL WAWVOF	0.9913 TB 0.0069 B 0.0018 SB 0.9932 TB 0.0037 B 0.0031 SB 0.7588 TB 0.2787 SB 0.0024 B	33 TB2 46 B2 47 SB2 34 TB6 47 SB9 48 B2 46 TB3 47 SB3 57 B3	38 → 15°
E	HUQJUY NUMCUT TUZYES WUCLIP WUCLOV-2	0.8692 E 0.1301 SB 0.9330 E 0.0669 HC 0.9359 E 0.0347 HC 0.0295 SB 0.8941 E 0.1051 SB 0.7410 E 0.2583 SB	35 E2 44 SB2 9 E2 27 HC2 19 E8 32 HC8 33 SB8 34 E2 41 SB2 40 E2 42 SB2	27 → 10°
SB	BIPWIG DIC TOY HABZIU HAGHED HOVTAN HUQKAF IPIHEU JAJZIE KARZUY MAWGAS NUCVIQ PEJPEZ PERYEQ POB QAS	0.9959 SB 0.0040 E 0.7918 SB 0.1313 E 0.0768 E 0.9979 SB 0.0015 E 0.7574 SB 0.2410 E 0.0016 HC 0.9291 SB 0.0682 B 0.0025 TB 0.9660 SB 0.0315 E 0.0023 B 0.8289 SB 0.1664 B 0.0044 TB 0.7470 SB 0.2514 E 0.0016 HC 0.9881 SB 0.0079 E 0.0040 B 0.8359 SB 0.1632 E 0.4953 SB 0.3758 B 0.1288 E 0.9993 SB 0.5187 SB 0.4795 E 0.0015 B 0.9957 SB 0.0027 HC 0.0016 E 0.6338 SB 0.2199 E 0.1463 HC	31 SB2 45 E2 44 SB9 47 E2 50 B2 36 SB9 51 E2 37 SB2 39 E2 51 HC2 39 SB9 46 B2 53 TB6 38 SB3 46 E8 53 B5 41 SB9 46 B2 53 TB6 33 SB3 36 E8 48 HC3 40 SB3 50 E8 53 B5 37 SB8 41 E8 46 SB8 48 B5 48 E8 45 SB8 41 E8 43 SB3, SB8 55 B5 57 SB5 67 E5 67 HC5 26 SB9 30 E9 31 HC9	40 → 16°

QASKUR	0.9990 SB	53 SB3	
QENBIV-1	0.9997 SB	48 SB9	
QENBIV-2	0.9889 SB 0.0101 HC 0.0011 E	34 SB11 46 HC11 50 E4	
TUZYAO	0.9678 SB 0.0321 TB	33 SB9 43 TB6	
VEKFUN	0.9053 SB 0.0880 E 0.0065 B	41 SB3 46 E8 53 B5	
VONLUF	0.6914 SB 0.2159 E 0.0926 E	44 SB8 48 B5 48 E8	
VONTOH	0.9521 SB 0.0247 E 0.0231 B	45 SB5 51 E5 53 B2	
VONTUN	0.9459 SB 0.0296 HC 0.0245 E	38 SB11 46 HC11 47 E11	
VORGUE	1.0000 SB	57 SB5	
WODCIB	0.9944 SB 0.0048 B	36 SB9 50 B2	
WUCLOV-1	0.9988 SB 0.0010 E	31 SB2 48 E2	
XIGBAQ	0.8666 SB 0.1148 B 0.0149 E	42 SB9 48 B2 51 E2	
XIGBEU	0.9992 SB	27 SB3	
YAHBAS	0.9134 SB 0.0581 B 0.0285 TB	45 SB2 52 B2 53 TB2	
ZAQWOD-1	0.5595 SB 0.4396 E	39 SB2 39 E2	
ZAQWOD-2	0.9564 SB 0.0421 B 0.0014 E	40 SB9 48 B2 54 E2	
ZUTHIF	0.6133 SB 0.3846 E 0.0022 HC	37 E2 38 SB2, SB9 51 HC2	
ZUTHOL	0.9855 SB 0.0136 E	27 SB8 40 E8	
<b>Deformación global 37 → 15°</b>			



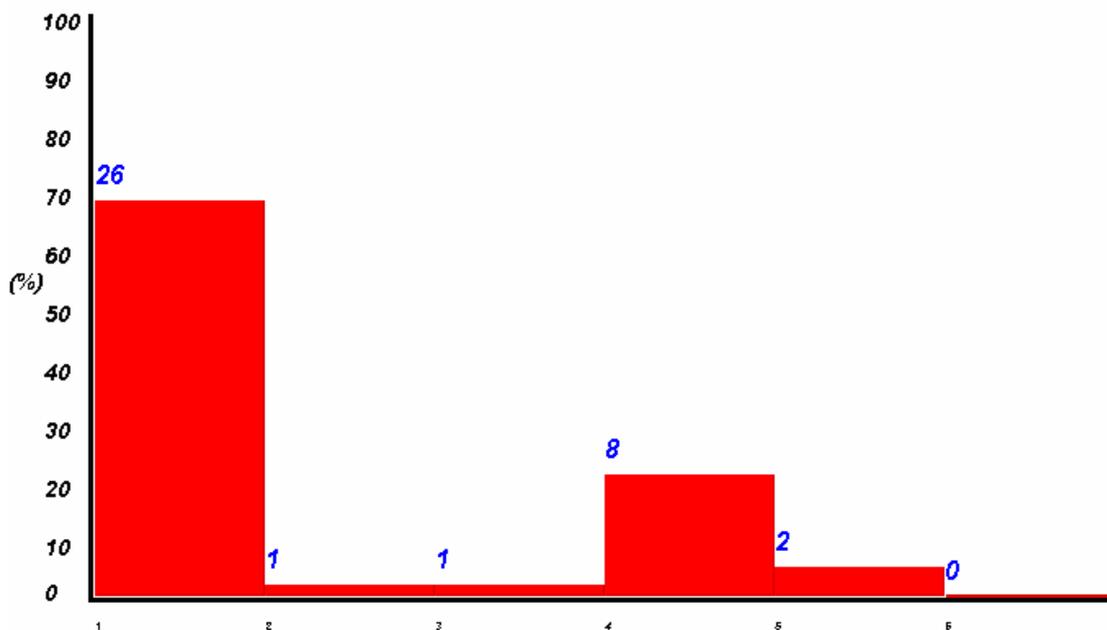
HISTOGRAMA platino 3

La conformación más abundante es la *boat* con un 50% de predominancia seguida de la *screw-boat* con un 38%, y unas desviaciones medias de 15 y 16°, respectivamente. La desviación media global es 15°

**Platino [4]**

Conf.	Refcode	Área de Estadística	Área de Química Inorg.	Def. media
C	GOTFAW-1	1.0000 C	39 C2	31→13°
	GOTFAW-2	1.0000 C	34 C1	
	IWALEX-1	1.0000 C	38 C2	
	IWALEX-2	1.0000 C	31 C2	
	MUDJEA	1.0000 C	47 C1	
	NUGCAT	1.0000 C	14 C1	
	PONLUC	1.0000 C	28 C2	
	SODPUW-1	1.0000 C	44 C2	
	SODPUW-2	1.0000 C	31 C1	
	SODRAE-2	1.0000 C	19 C1	
	SONNOY-1	1.0000 C	42 C1	

	SONNOY-2	1.0000 C		22 C1		
	TOFNOR	1.0000 C		24 C2		
	TOFREL-2	1.0000 C		27 C1		
	TOGHIG-1	1.0000 C		28 C2		
	TOGHIG-2	1.0000 C		38 C1		
	TOGHIG-3	1.0000 C		38 C1		
	TOGHIG-4	1.0000 C		26 C2		
	TOQJEU-1	1.0000 C		21 C1		
	TOQJIS-2	1.0000 C		29 C1		
	TOQJOY-1	1.0000 C		19 C2		
	WECRIF-1	0.9999 C		41 C1		
	WECRIF-2	1.0000 C		38 C2		
	WECRIF-3	0.9958 C 0.0023 E 0.0019 HC		45 C1 53 E8 55 HC3, HC8		
	XOTSUU	1.0000 C		31 C2		
	ZOCWIX	1.0000 C		21 C2		
B	ALALOO	1.0000 B		14 B6		14→6°
TB	DEYLID	1.0000 TB		19 TB4		19→7°
	FATGEN	0.9784 E 0.0216 HC		37 E2 47 HC9		33→14°
	NUMWIB	0.9996 E		32 E8		
	QUQMUE	0.8889 E 0.1109 HC		48 E2 52 HC9		
E	TOFREL-1	0.7913 E 0.2084 HC		28 E8 32 HC8		
	TOQJED-2	0.6991 E 0.2667 SB 0.0342 HC		26 E7 29 SB2 35 HC2		
	TOQJIS-1	0.7349 E 0.2417 HC 0.0235 C		47 E2 49 HC2 57 C2		
	TOQJOY-2	0.9797 E 0.0170 HC 0.0033 SB		15 E8 33 HC8 37 SB8		
	WUDTIY	0.9966 E 0.0034 HC		32 E8 47 HC8		
HC	GIBGED	0.9486 HC 0.0356 E 0.0158 SB		12 HC3 29 E8 31 SB3		35→15°
	SODRAE-1	0.5949 HC 0.2055 E 0.1996 C		57 HC2 59 E2 62 C2		
<b>Deformación media global</b>				<b>31→13°</b>		



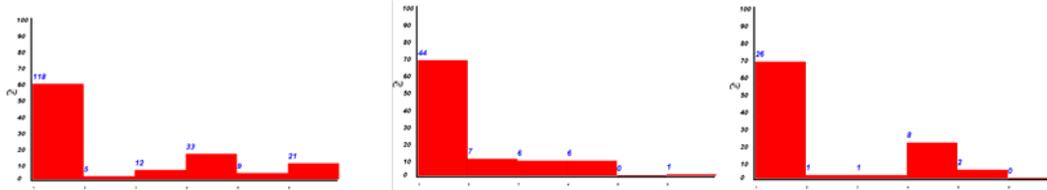
La conformación más abundante es la *chair* con un 68% y deformación media de 13°, seguida de la *envelope* con el 21%. La deformación media global es también de 13°.

En la tabla siguiente se resumen todos los datos anteriores: quelato de cada metal, número de fragmentos, abundancia de los mismos en porcentaje, deformación media de cada conformación y deformación media de todo el conjunto (global):

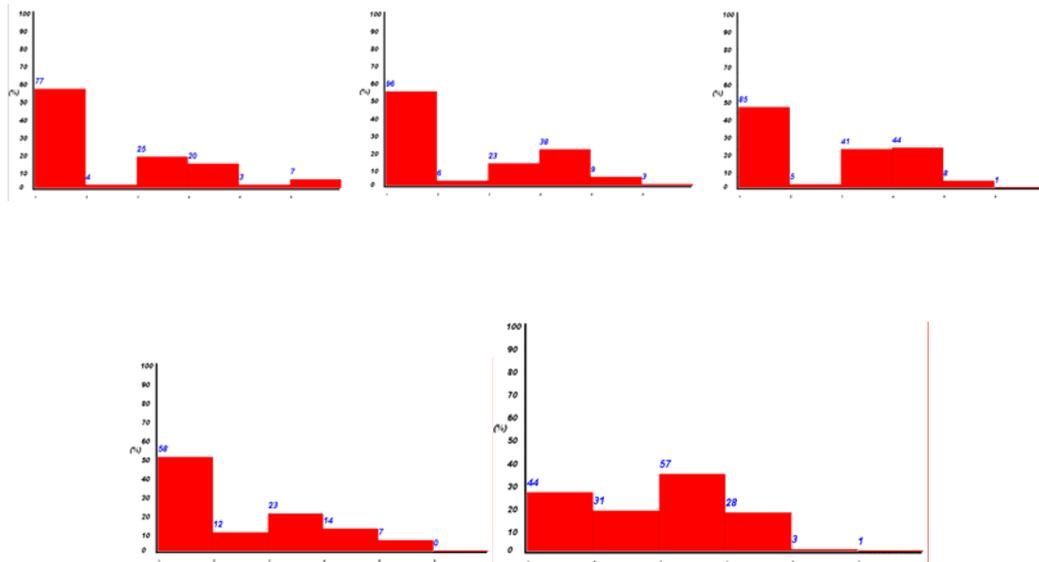
	n° frag.	abundancia %	deform.	def. media
[1] Ni	2582	61% C 13% E 10% TB 8% B 5% HC 3% SB	---	---
[2] Ni	164	35% TB 27% C 19% B	9° 14° Ver	12°
[3] Ni	128	30% SB 28% B 14% C 14% HC	15° 13° Ver ver	13°
[4] Ni	114	51% C 20% TB 12% E	11° 11° ver	12°
[1] Pd	198	60% C 17% E 11% SB	11° 12° ver	11°
[2] Pd	184	46% C 24% E 22% TB	15° 15°	14°
[3] Pd	18	56% B 28% SB 11% E	17° 16° ver	17°
[4] Pd	64	69% C 11% B 9% TB 9% E	13° 12° Ver ver	13°
[1] Pt	136	57% C 18% TB 15% E	14° 10° ver	13°
[2] Pt	175	55% C 22% E 13% TB	17° 13° ver	15°
[3] Pt	86	50% B 38% SB 6% E	15° 16° ver	15°
[4] Pt	38	68% C 21% E 5% HC	13° 14° ver	13°

Los resultados anteriores se pueden resumir de la siguiente forma:

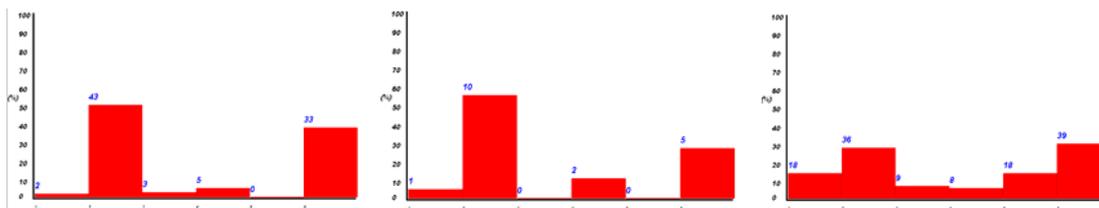
- La muestra más abundante es la correspondiente al complejo [1] de níquel: 2582 fragmentos distribuidos en 61% C, 13% E, 10% TB, 8% B, 5% HC y 3% SB. Con más del 60% de C se dan también en [1] paladio, [4] paladio y [4] platino.



- La suma de la abundancia para C+TB+E es mayor del 80% en [1] platino (90%), [2] platino (90%), [2] paladio (92%) y [4] níquel (83%, más 11% de B) , ordenadas de mayor a menor abundancia de conformación *chair*. Hay un quinto caso, [2] níquel (79%) que presenta un 19% de *boat*.



- En los casos [3] platino, [3] paladio y [3] níquel la poca presencia de la conformación *chair* facilita la mayor abundancia de B+SB: 88%, 84% y 58%, respectivamente.



Podemos, por tanto, concluir que hay tres grandes grupos:

1. [1] níquel, [1] paladio, [4] paladio y [4] platino.
2. [1] platino, [2] platino, [2] paladio, [4] níquel y [2] níquel.
3. [3] platino, [3] paladio y [3] níquel.

Finalmente, vamos a comparar los resultados de las diaminas de níquel (denominadas [1] níquel), las más abundantes de este Proyecto, con las diaminas de cobalto estudiadas en un anterior Proyecto Fin de Carrera realizado también en el Área de Química Inorgánica en diciembre de 2007.

Conformación	níquel		cobalto	
	Cantidad	%	Cantidad	%
<i>chair</i>	1572	<b>60.88</b>	766	<b>42.18</b>
<i>boat</i>	203	<b>7.86</b>	445	<b>24.50</b>
<i>twist-boat</i>	253	<b>9.80</b>	268	<b>14.76</b>
<i>envelope</i>	347	<b>13.44</b>	194	<b>10.68</b>
<i>half-chair</i>	130	<b>5.03</b>	75	<b>4.13</b>
<i>screw-boat</i>	77	<b>2.98</b>	68	<b>3.74</b>
Total	2582	<b>99.99</b>	1816	<b>99.99</b>

Los resultados son diferentes aunque la conformación más abundante en ambos casos es la *chair*. Esto sugiere que el metal influye en la distribución de conformaciones aunque la posible explicación está fuera del alcance de este Proyecto Fin de Carrera.

### IV.3.- APLICACIÓN DEL MÉTODO JERÁRQUICO CON DISTINTA VARIANZA A LOS COMPLEJOS DE PALADIO CON LIGANDOS N,N, [1]

El Área de Estadística de la UPCT ha elaborado diferentes programas basados en métodos estadísticos. Entre ellos destacan los denominados Jerárquico (con Igual y Distinta Varianza) y EM Clustering (también con Igual y Distinta Varianza). En Proyectos Fin de Carrera anteriores se han utilizado para diferentes conjuntos de datos. Nuestra experiencia es que los resultados aportados por todos ellos son muy similares pero el que mejor se adapta a nuestras necesidades es el Jerárquico con Distinta Varianza. Por ello, éste es el método que vamos a aplicar al conjunto de datos más numeroso de que disponemos: los complejos de paladio con ligandos N,N, es decir, el denominado como [1]. Además, también sabemos que 15 *clusters* es un número adecuado para el volumen de datos con el que trabajamos.

En la tabla siguiente se recogen los *refcode* de los 198 fragmentos, los resultados del Método de Clasificación para las conformaciones con probabilidad no nula, la(s) deformación(es) de la(s) estructura(s) y la posición inicial y final de cada *cluster* en las sucesivas particiones (en negrita se refleja su centroide):

<i>Refcode</i>	Área de Estadística	Área Química Inorgánica	Partición	
BAQGOP	1.0000 C	15 C2	1→1	
BAQGUV-2	1.0000 C	15 C2		
BEQLUE-1	1.0000 C	12 C1		
BEQLUE-2	1.0000 C	23 C1*		
FAZYEK-1	1.0000 C	25 C1		
FAZYEK-2	1.0000 C	18 C1*		
JEVMOX-2	1.0000 C	18 C2*		
LELTUR-2	1.0000 C	33 C2*		
<b>NABDAW-2</b>	1.0000 C	18 C2		
NAQZOV-3	1.0000 C	18 C1		
OCIJOA	1.0000 C	19 C2		
REVQEO	1.0000 C	33 C1		
TAFTUQ	1.0000 C	27 C2		
TOBJEZ	1.0000 C	31 C1		
TOZYUC-2	1.0000 C	11 C1		
ZIQZOO-1	1.0000 C	23 C2		
ZIQZOO-2	1.0000 C	18 C1*		
ZIQZUU-2	1.0000 C	8 C2		
BAQGUV-1	0.9847 SB 0.0153 TB	33 SB6 46 TB3		2→2
BAQGUV-4	0.9873 TB 0.0120 B	33 TB3 44 B3		
<b>DAGYUZ</b>	1.0000 TB	7 TB1		
FEJKUB	0.9957 TB 0.0043 B	27 TB4 43 B4		
JOQQIP	1.0000 B	41 B1		
MUPBOO	1.0000 TB	10 TB4		
NAQZUB-2	0.7369 SB 0.2544 TB	45 SB2 49 TB2 55 B2		
NAQZUB-4	0.9994 TB	35 TB6		
PYDCUB-1	0.9269 SB 0.0731 TB	45 SB4 51 TB1		
PYDCUB-2	0.8795 SB 0.1201 TB	45 SB4 51 TB1		
TAFTIE	1.0000 TB	18 TB1		
TAFTOK	1.0000 TB	19 TB4		
YAZMER	0.8522 TB 0.1478 B	36 TB3 39 SB3		

YAZPAR YAZBEV	1.0000 TB 1.0000 TB	7 TB4 15 TB1	
BEPLOY-1 <b>BEPLUE-3</b> BEPLUE-4 BEPMAL-2 BEPMEP-1 BEPMEP-2 EFIHUW-2 EHUNAW-2 SEYPAN-4 SEYPAN-5 SEYPAN-6 SEYPER-1 XELSOX-1 XELSOX-2	1.0000 C 1.0000 C	20 C2 20 C1 21 C1 18 C1 18 C2 17 C2 23 C1 18 C1 22 C1 21 C1 22 C1 23 C2 17 C2 18 C2	1→3
BAQGUV-3 BUXSOC-1 CADKUN-1 CETNIZ DACHPD EKAPUB HAKQIU HAPIPD10 MOZYEF PRBXP QOVRIC QOVROI QOYRUO TOBJID-4 <b>TOZYUC-1</b> UCOBAQ UNABIU UNABUG WUFVEY-1	0.9543 HC 0.0457 E 0.5145 C 0.4742 HC 0.8011 C 0.0752 E 0.1237 HC 0.8886 E 0.1114 HC 0.9764 E 0.0236 HC 0.9838 HC 0.0162 E 0.9074 HC 0.0926 E 0.8335 E 0.1496 HC 0.0169 C 0.8524 E 0.1476 HC 0.8726 E 0.0882 HC 0.0392 C 0.7807 E 0.2193 HC 0.7069 E 0.2931 HC 0.9121 E 0.0879 HC 0.9940 C 0.0052 HC 0.6052 E 0.3948 HC 0.5446 E 0.3056 C 0.1497 HC 0.9309 E 0.0691 HC 0.9494 E 0.0506 HC 0.7127 C 0.2326 E 0.0547 HC	32 HC6 41 E6 45 HC3 39 C1 53 E8 49 C1, HC3 50 E8 34 E8 40 HC3 0.9764 E 0.0236 HC 27 HC8 41 E1, E8 34 HC2 40 E7 46 E8 50 HC3 51 C1 34 E2 39 HC2 50 E8 55 HC8 59 C1 30 E2 46 HC2 32 E2 50 HC2 21 E8 30 HC3 43 C1 51 HC5 36 E8 38 HC3 48 E2 52 HC2, HC9 53 C2 31 E2 38 HC9 37 E8 45 HC3 51 E2 53 C2 55 HC2	2→4
BUXSES10 BUXSIW-2 BUXSOC-2 IXIYOD-1 IXIYOD-2 IXIYUJ-1 JEVWUD PABJIM-1 PABJIM-2 <b>QASKIF-2</b> QILLUS-1 UNACAN-2	1.0000 C 1.0000 C	34 C1 36 C2 36 C2 35 C1 36 C2 34 C1 36 C2 34 C1 35 C1 35 C1 35 C1 35 C1 36 C2	1→5
BEPLOY-2 BEPLUE-1 BEPLUE-2 <b>BEPMAL-1</b> BEPMEP-3 BEPMEP-4 BEPMIT-1 EFIHUW-1 EHUNAW-1 LUYCOX-2 SEYPAN-1 SEYPAN-2 SEYPAN-3 SEYPER-2 TOBJID-2 XELSOX-3 XELSOX-4	1.0000 C 1.0000 C	16 C1 15 C2 13 C2 13 C2 13 C1 12 C1 13 C2 18 C2 14 C2 11 C2 12 C2 17 C2 15 C2 13 C1 13 C1 12 C1 11 C1	1→3→6
DAGFEW DEPSAS HISTPD JESBUF JOSYUL KEXMAC NABDAW-1	0.4524 SB 0.2928 E 0.2548 HC 0.9627 E 0.0371 HC 0.9618 SB 0.0316 HC 0.0066 E 0.9780 E 0.0166 HC 0.0054 SB 0.4951 E 0.4913 HC 0.0136 SB 0.9626 SB 0.0314 E 0.0059 B 0.8524 E 0.1476 HC	21 SB9 23 E2 24 HC9 19 E8 32 HC8 22 SB2 34 HC2 39 E2 20 E8 35 HC3 38 SB8 30 E2 30 HC9 40 SB9 42 SB3 50 E8 54 B5 34 E2 39 HC2	2→7

NADFED	0.9869 E 0.0130 HC	5 E8 32 HC3	
NAQZUB-1	0.5837 SB 0.4002 E 0.0159 B	44 SB9 44 E2 52 B2	
NAQZUB-3	0.9610 SB 0.0383 E	31 SB6 40 E11	
NIMZAK	0.9912 SB 0.0063 HC 0.0025 E	15 SB9 35 HC9 38 E2	
NOLZAP-1	0.9959 SB 0.0028 HC 0.0014 E	15 SB2 37 HC2 39 E7	
NOLZAP-2	0.9209 SB 0.0770 HC 0.0021 E	11 SB2 25 HC2 37 E2	
OCEPER-1	0.9541 E 0.0457 SB	39 E2 46 SB9	
OCEPER-2	0.7608 E 0.2381 SB 0.0011 HC	40 E8 43 SB8 54 HC8	
PEVKEG	0.8112 HC 0.1693 E 0.0195 SB	16 HC2 24 E7 31 SB2	
RIRTER	0.7037 SB 0.2880 HC 0.0083 E	15 SB2 20 HC2 34 E2	
TOBJID-1	0.9389 E 0.0596 SB 0.0016 HC	33 E2 40 SB9 48 HC9	
<b>TOBJID-3</b>	0.8469 E 0.1301 SB 0.0229 HC	26 E2 33 SB2 38 HC2	
UKADAL	0.9874 E 0.0123 SB	35 E9 47 SB9	
VIWSUP	0.4466 HC 0.2919 E 0.2614 SB	26 HC8 27 E1 28 SB8	
WEDWUX-2	0.7061 SB 0.2826 HC 0.0113 E	16 SB9 21 HC9 33 E2	
WEDXAE	0.8674 SB 0.1220 E 0.0106 HC	26 SB9 32 E2 39 HC9	
HIXXER	0.6834 SB 0.2463 HC 0.0703 E	54 SB9 56 HC9 58 E2	2→7→8
ILIZUY-1	0.8558 HC 0.1339 E 0.0103 SB	43 HC2 47 E2 52 SB2	
ILIZUY-2	0.7753 HC 0.1842 SB 0.0404 E	52 HC3 54 SB3 58 E3	
ILOBAM-1	0.9869 SB 0.0123 HC	67 SB2 73 HC2	
ILOBAM-2	0.4814 HC 0.2838 HC 0.2348 SB	42 HC9 43 E2 44 SB9	
QILLOM-2	0.9985 SB	53 SB9	
QILLUS-2	0.5142 HC 0.4624 SB 0.0235 E	53 HC2 53 SB2 59 E2	
XIDDUK-1	0.8056 SB 0.1821 HC 0.0123 E	65 SB3 67 HC3 71 E8	
XIDDUK-2	0.8024 SB 0.1826 HC 0.0150 E	37 SB2 41 HC2 47 E2	
JEDDIF-1	1.0000 C	26 C2	1→9
<b>JEDDIF-2</b>	1.0000 C	26 C2	
JEUWOX-1	1.0000 C	26 C2	
LELTUR-1	1.0000 C	23 C1	
LUYCOX-1	1.0000 C	25 C1	
TANXAI-1	1.0000 C	28 C2	
TANXAI-2	1.0000 C	26 C2	
TANXEM-1	1.0000 C	24 C2	
TANXEM-2	1.0000 C	24 C2	
UNABOA	1.0000 C	28 C2	
ZIJZAT	1.0000 C	28 C1	
BIGMEJ	0.9418 E 0.0582 HC	17 E8 29 HC3	2→4→10
GOSJED-1	0.9938 E 0.0062 HC	29 E8 45 HC3, HC8	
GOSJED-2	0.9957 E 0.0043 HC	28 E2 45 HC2, HC9	
GOSJED-3	0.9970 E 0.0030 HC	26 E8 44 HC3, HC8	
<b>LADMIN</b>	0.9925 E 0.0075 HC	19 E8 37 HC3	
NAQZOV-1	0.9864 E 0.0135 HC	25 E2 38 HC2	
NAQZOV-2	0.99796 E 0.0204 HC	27 E8 39 HC8	
XUVQIU-1	0.9861 E 0.0139 HC	14 E2 35 HC2	
XUVQIU-2	0.9860 E 0.0140 HC	14 E8 36 HC3	
XUVQIU-3	0.9760 E 0.0240 HC	15 E2 32 HC2	
XUVQIU-4	0.9796 E 0.0204	15 E8 37 HC3	
<b>BUXSIW-1</b>	1.0000 C	39 C2	1→5→11
CADJAS-1	1.0000 C	39 C1	
CADJAS-2	1.0000 C	36 C2	
CADKUN-2	1.0000 C	41 C1	
CADKUN-3	0.9994 C	42 C2	
CADKUN-4	0.9999 C	43 C2	
CADLEY-1	1.0000 C	41 C1	
CADLEY-2	1.0000 C	40 C2	
DAMPPD10-1	1.0000 C	30 C2	
DUJSUW	1.0000 C	39 C2	
HDPDNT10	1.0000 C	36 C1	
IXIYUJ-2	1.0000 C	39 C1	
IXIYUJ-4	1.0000 C	37 C2	
LUYDEO	0.9953 C 0.0031 HC 0.0015 E	48 C1 56 HC3 57 E8	
QILLOM-1	0.9995 C	46 C1	
QILMAZ	1.0000 C	41 C1	
UJUYUT-1	1.0000 C	42 C1	
UNABAM	1.0000 C	39 C2	
UNACAN-3	1.0000 C	40 C2	
BEPMIT-2	1.0000 C	13 C1	1→3→6→12
FEHJEI	1.0000 C	15 C2	
FEHJIM	1.0000 C	16 C2	
ILOBIU-1	1.0000 C	13 C2	
ILOBIU-2	1.0000 C	16 C1	

MOZYIJ	1.0000 C	14 C1	
ROMHEG-1	1.0000 C	13 C2	
ROMHEG-2	1.0000 C	16 C1	
<b>YAZMAN</b>	1.0000 C	13 C2	
ZIQZAA-2	1.0000 C	13 C1	
ZIQZEE-2	1.0000 C	10 C1	
ZIQZII-2	1.0000 C	10 C2	
DAMPPD10	1.0000 C	30 C2	1→5→13
IXIYUJ-3	1.0000 C	31 C2	
QASKIF-1	1.0000 C	33 C1	
TACVOI	1.0000 C	33 C1	
UJUYUT-1	1.0000 C	42 C1	
UJUYUT-2	1.0000 C	37 C2	
UJUYUT-3	1.0000 C	34 C2	
UNABEQ	1.0000 C	34 C2	
UNACAN-1	1.0000 C	32 C2	
WUFVEY-2	1.0000 C	37 C2	
<b>WUFVEY-3</b>	1.0000 C	35 C2	
<b>ZIQZAA-1</b>	1.0000 B	22 B5	2→14
ZIQZEE-1	1.0000 B	19 B5	
ZIQZII-1	1.0000 B	21 B2	
ZIQZUU-1	1.0000 B	30 B2	
<b>TOBJOJ-1</b>	1.0000 TB	22 TB3	2→15
TOBJOJ-2	1.0000 TB	22 TB2	

De los resultados obtenidos observamos que en:

- la primera partición, la denominada 1→1, recoge 18 estructuras *chair*. Esta situación se da también en la 1→3, 1→5, 1→3→6, 1→9, 1→5→11, 3→6→12 y 1→5→13.
- la partición 2→2 corresponde a las conformaciones mayoritarias *twist-boat* y *screw-boat*.
- la partición 2→4 corresponde a las conformaciones mayoritarias *envelope* y *half-chair*. Este *cluster* se desdobla posteriormente a 2→4→10.
- la partición 2→7 corresponde a las conformaciones mayoritarias *envelope* y *screw-boat*. La partición 2→7→8 es *screw-boat* y *half-chair*.
- las dos últimas particiones aparecen 4 conformaciones *boat* en la 2→14 y 2 *twist-boat* en la 2→15.

El método aplicado aporta también los siguientes datos: número de fragmentos, *refcode* y, entre paréntesis, la desviación estándar. El asterisco indica la parte de la muestra que se va a desdoblar para conformar el siguiente *cluster*.

#### 2 clusters

114 OCIJOA (7.6062)

84 DAGFEW (20.8055)

3 clusters

71 IXIYUJ-3 (5.1891)  
84 DAGFEW  
43 YAZMAN (3.3468)

4 clusters

71 IXIYUJ-3  
54 NOLZAP-1 (18.4138)  
43 YAZMAN  
30 UNABIN (7.9699)

5 clusters

29 OCIJOA (4.9999)  
54 NOLZAP-1  
43 YAZMAN  
30 UNABIU  
42 UNACAN-2 (2.5644)

6 clusters

29 OCIJOA  
54 NOLZAP-1  
14 BEPLUE-3 (1.2906)  
30 UNABIU  
42 UNACAN-2  
29 BEPMEP-4 (2.4846)

7 clusters

29 OCIJOA  
21 BAQGUV-4 (12.9372)  
14 BEPLUE  
30 UNABIU  
42 UNACAN-2  
29 BEPMEP-4  
33 DAGFEW (13.8937)

8 clusters

29 OCIJOA  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
30 UNABIU  
42 UNACAN-2  
29 BEPMEP-4  
24 TOBJID-3 (8.5385)  
9 HIXXER (6.5025)

9 clusters

18 NABDAW-2 (5.6765)  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
30 UNABIU  
42 UNACAN-2  
29 BEPMEP-4  
24 TOBJID-3  
9 HIXXER  
11 JEDDIF-2 (1.3332)

10 clusters

18 NABDAW-2  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
19 TOZYUC-1 (7.2415)  
42 UNACAN-2  
29 BEPMEP-4  
24 TOBJID-3  
9 HIXXER  
11 JEDDIF-2  
11 LADMIN (3.1316)

11 clusters

18 NABDAW-2  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
19 TOZYUC-1  
23 TACVOI (1.9587)  
29 BEPMEP-4  
24 TOBJID-3  
9 HIXXER  
11 JEDDIF-2  
11 LADMIN  
19 BUXSIW-1 (2.9331)

12 clusters

18 NABDAW-2  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
19 TOZYUC-1  
23 TACVOI  
17 BEPMAL-1 (1.6457)  
24 TOBJID-3  
9 HIXXER  
11 JEDDIF-2  
11 LADMIN  
19 BUXSIW-1  
12 YAZMAN (2.2314)

13 clusters

18 NABDAW-2  
21 BAQGUV-4  
14 BEPLUE-3  
19 TOZYUC-1  
12 QASKIF-2 (0.9630)  
17 BUXSIW-1  
24 TOBJID-3  
9 HIXXER  
11 JEDDIF-2  
11 LADMIN  
19 BUXSIW-1  
12 YAZMAN  
11 WUFVEY-3 (1.8867)



Observamos que hasta el 13° *cluster* las particiones tienen valores significativos (sólo en los dos últimos se obtienen valores de 4 y 2) por lo que la discusión la vamos a efectuar para la totalidad de los *clusters*.

Los 198 datos se dividen en dos grandes *clusters*:

-- el 1→1 con 114 datos, todos con la conformación *chair* como más probable, que se fraccionará en otros *clusters* menores en los que la única diferencia va a ser el centroide y, por tanto, la ruta o camino a seguir, marcada por los valores de las siguientes conformaciones más probables.

-- el 2→2 con 84 datos en los que aparecen las restantes conformaciones excepto la *chair*. Las sucesivas divisiones nos llevan a *clusters* con conformaciones más probables HC-E para el 2→4, SB-E para el 2→7, hasta acabar con el *cluster* 14 que contiene sólo cuatro conformaciones *boat* y el *cluster* 15 que tiene dos *twist-boat*.

Todos los *clusters* obtenidos respetan el diagrama obtenido para las diferentes rutas en el ciclohexano.

Para completar el estudio vamos a recoger también los resultados de aplicar el Método de Clasificación a los centroides de los 15 *clusters*. En la tabla siguiente se recogen los resultados para los valores de  $\sigma = 10^\circ$ ,  $\sigma = 20^\circ$  y  $\sigma = 30^\circ$  para las seis conformaciones canónicas del ciclohexano y para sus quince conformaciones expandidas:

Refcode (ángulos de torsión)	10°	20°	30°	10°	20°	30°
	6 conformaciones			15 conformaciones		
NABDAW-2 (-49.42 48.17 -58.76 61.69 -63.66 62.28)	1.0000 C	0.9996 C	0.9641 C 0.0214 HC 0.0137 E	1.0000 C1	0.9987 C1	0.8882 C1 0.0197 HC1, HC2, HC3 0.0126 E1, E2, E3, E4
DAGYUZ -68.87 26.73 -31.60 58.83 -22.26 43.92	0.9999 TB	0.9036 TB 0.0801 B 0.0162 SB	0.6359 TB 0.2506 B 0.0953 SB 0.0099 E 0.0083 HC	0.5000 TB1 0.5000 TB2	0.4481 TB1 0.4481 TB2 0.0397 B1, B2 0.0080 SB1, SB2, SB3	0.2995 TB1, TB2, 0.1180 B1, B2 0.0449 SB1, SB2, SB3 0.0047 E1, E2, E3, E4 0.0039 HC1, HC2, HC3
BEPLUE-3	1.0000 C	1.0000 C	0.9960 C 0.0025 HC 0.0015 E	1.0000 C1	1.0000 C1	0.9868 C1 0.0024 HC1, HC2, HC3 0.0015 E1, E2, E3, E4
TOZYUC-1	0.5837 E 0.4163 HC	0.4686 HC 0.4225 E 0.0988 C 0.0102 SB	0.3429 HC 0.3008 C 0.2979 E 0.0582 SB	0.1629 E1, E2, E3, E4 0.1162 HC1, HC2, HC3	0.1453 HC1, HC2, HC3 0.1310 E1, E2, E3, E4 0.0032 SB1, SB2, SB3 0.0306 C1	0.1272 HC1, HC2, HC3 0.1105 E1, E2, E3, E4 0.1116 C1 0.0216 SB1, SB2, SB3
QASKIF-2	1.0000 C1	0.9900 C 0.0062 HC	0.8895 C 0.0616 HC	1.0000 C1	0.9671 C1 0.0037 E1, E2, E3, E4	0.7025 C1 0.1272 HC1, HC2, HC3

		0.0037 E	0.0453 E 0.0036 SB		0.0061 HC1, HC2, HC3	0.1105 E1, E2, E3, E4 0.0216 SB1, SB2, SB3
BEPMAL-1	1.0000 C1	1.0000 C	0.9875 C 0.0076 HC 0.0047 E	1.0000 C1	0.9999 C1	0.9589 C1 0.0074 HC1, HC2, HC3 0.0046 E1, E2, E3, E4
TOBJID-3	0.4761 SB 0.4754 E 0.0485 HC	0.3876 SB 0.3801 E 0.2305 HC 0.0011 B	0.3334 SB 0.3240 E 0.2844 HC 0.0301 B 0.0268 TB 0.0013 C	0.1370 SB1, SB2, SB3 0.1368 E1, E2, E3 0.0139 HC1, HC2, HC3	0.1255 E1, E2, E3, E4 0.1050 SB1, SB2, SB3 0.0102 HC1, HC2, HC3 0.077 B1, B2	0.1021 SB1, SB2, SB3 0.0993 E1, E2, E3, E4 0.0871 HC1, HC2, HC3 0.0092 B1, B2 0.0082 TB1, TB2
HIXXER	0.7058 SB 0.2595 HC 0.0348 E	0.4208 SB 0.3682 HC 0.2109 E	0.3599 HC 0.3554 SB 0.2692 E 0.0072 TB 0.0064 B 0.0018 C	0.2326 SB1, SB2, SB3 0.0855 HC1, HC2, HC3 0.0115 E1, E2, E3, E4	0.1955 SB1, SB2, SB3 0.1088 B1, B2 0.0522 HC1, HC2, HC3 0.0098 E1, E2, E3, E4	0.1107 HC1, HC2, HC3 0.1093 SB1, SB2, SB3 0.0828 E1, E2, E3, E4 0.0022 TB1, TB2 0.0020 B1, B2
JEDDIF-2	1.0000 C	0.9989 C	0.9513 C 0.0282 HC 0.0193 E 0.0012 SB	1.0000 C1	0.9963 C1	0.8519 C1 0.0252 HC1, HC2, HC3 0.0173 E1, E2, E3, E4 0.0010 SB1, SB2, SB3
LADMIN	0.9892 E 0.0108 HC	0.6343 E 0.3256 HC 0.0397 SB	0.4200 E 0.3912 HC 0.1499 SB 0.0359 HC 0.0019 B 0.0012 TB	0.2480 E1, E2, E3, E4 0.0047 HC1, HC2, HC3	0.1746 E1, E2, E3, E4 0.0896 HC1, HC2, HC3 0.0109 SB1, SB2, SB3	0.1256 E1, E2, E3, E4 0.1169 HC1, HC2, HC3 0.0448 SB1, SB2, SB3 0.0107 C1
BUXSIW	1.0000 C	0.9745 C 0.0151 HC 0.0104 E	0.8456 C 0.0842 HC 0.0645 E 0.0057 SB	1.0000 C1	0.9181 C1 0.0143 HC1, HC2, HC3 0.0098 E1, E2, E3, E4	0.6158 C1 0.0613 HC1, HC2, HC3 0.0470 E1, E2, E3, E4 0.0042 SB1, SB2, SB3
YAZMAN	1.0000 C	1.0000 C	0.9911 C 0.0055 HC 0.0033 E	1.0000 C1	1.0000 C1	0.9706 C1 0.0054 HC1, HC2, HC3 0.0032 E1, E2, E3, E4
WUFVEY	1.0000 C	0.9966 C 0.0021 HC 0.0013 E	0.9293 C 0.0397 HC 0.0291 E 0.0020 SB	1.0000 C1	0.9887 C1 0.0021 HC1, HC2, HC3 0.0013 E1, E2, E3, E4	0.7940 C1 0.0248 E1, E2, E3, E4 0.0339 HC1, HC2, HC3 0.0017 SB1, SB2, SB3
ZIQZAA-1	1.0000 B	0.9783 B 0.0195 TB 0.0019 SB	0.7388 B 0.1884 TB 0.0531 SB 0.0135 E 0.0062 HC	0.5000 B1, B2	0.4886 B1, B2 0.0097 TB1, TB2	0.3541 B 0.0903 TB1, TB2 0.0254 SB1, SB2, SB3 0.0065 E1, E2, E3, E4 0.0030 HC1, HC2, HC3
TOBJOJ-1	1.0000 TB	0.9195 TB 0.0503 B 0.0299 SB	0.6219 TB 0.2224 B 0.1301 SB 0.0136 E	0.5000 TB1, TB2	0.4529 TB1, TB2 0.0248 B1, B2 0.0147 SB1, SB2, SB3	0.2867 TB1, TB2 0.1025 B1, B2 0.0600 SB1, SB2, SB3 0.0063 E1, E2, E3, E4 0.0055 HC1, HC2, HC3

De la simple observación de la tabla deducimos que la ampliación del estudio a las conformaciones expandidas no aporta nada significativo por lo vamos a reducir la tabla al estudio de las probabilidades para las seis conformaciones canónicas y, por claridad, al caso de  $\sigma = 30^\circ$ , quedando como sigue, una vez redondeados los resultados a sólo dos cifras significativas:

Refcode (ángulos de torsión)	$\sigma = 30^\circ$
NABDAW-2 (-49.42 48.17 -58.76 61.69 -63.66 62.28)	0.96C 0.02HC 0.01E
DAGYUZ (-68.87 26.73 -31.60 58.83 -22.26 43.92)	0.64TB 0.25B 0.10SB 0.01E 0.01HC
BEPLUE-3 (-66.18 67.28 -70.90 64.42 -65.57 71.31)	0.99 C 0.001HC 0.001E
TOZYUC-1 (-72.83 47.87 -22.84 18.05 -38.19 66.41)	0.34HC 0.30C 0.30E 0.06SB
QASKIF-2 (37.64 -38.15 56.12 -70.77 70.14 -54.94)	0.89C 0.06HC 0.05E 0.004SB
BEPMAL-1 (55.31 -55.60 66.85 -66.00 64.42 -65.22)	0.9875 C 0.01HC 0.005E
TOBJID-3 (17.03 -7.08 32.11 -68.27 58.30 -12.92)	0.33SB 0.32E 0.28HC 0.03B 0.03TB 0.001C
HIXXER (0.25 -3.61 15.89 -25.29 22.33 -9.12)	0.36 HC 0.36SB 0.27E 0.007TB 0.006B 0.002C
JEDDIF-2 (-45.14 43.14 -57.63 67.98 -69.43 61.13)	0.95C 0.03HC 0.02E 0.001SB
LADMIN (3.91 -5.43 36.41 -73.51 71.16 -33.26)	0.42E 0.39 HC 0.15SB 0.04HC 0.002B 0.001TB
BUXSIW (-34.22 34.97 -55.56 71.70 -71.52 54.95)	0.8456 C 0.0842 HC 0.0645 E 0.0057 SB
YAZMAN (59.54 -60.85 70.12 -64.60 61.13 -65.53)	0.9911 C 0.0055 HC 0.0033 E
WUFVEY (-40.46 39.14 -58.00 72.20 -72.76 60.03)	0.9293 C 0.0397 HC 0.0291 E 0.0020 SB
ZIQZAA-1 (-60.51 61.62 -16.12 54.89 -56.25 13.90)	0.7388 B 0.1884 TB 0.0531 SB 0.0135 E 0.0062 HC
TOBJOJ-1 (-52.68 20.64 -30.48 66.65 -28.88 34.19)	0.6219 TB 0.2224 B 0.1301 SB 0.0136 E

Los centroides en los que la conformación *chair* es mayoritaria, NABDAW-2, BEPLUE-3, etc., sólo se diferencian entre ellos en los distintos valores de los ángulos de torsión (más o menos cercanos a 60, -60, 60, -60, 60, -60).

Hay dos centroides con la conformación *twist-boat* como mayoritaria, DAGYUZ y TOBJOJ-1. Ambos están distorsionados hacia la conformación *boat* y los valores de los ángulos de torsión se alejan del teórico 33, 33, -70, 33, 33, -70.

Hay dos centroides con la conformación *half-chair* como más probable, el representado por TOZYUC-1 (con la *chair* como 2ª conformación) y el representado por HIXXER (con *screw-boat* como segunda más probable).

Hay un centroide para cada una de las tres conformaciones restantes: *screw-boat* (TOBJID-3), *envelope* (LADMIN) y *boat* (ZIQZAA-1).

Estos resultados nos llevan a la conclusión de que el estudio de los centroides de los diferentes *clusters* aporta, también, información acerca de las diferentes rutas en las conformaciones del ciclohexano.

**V.- CONCLUSIONES**

1. Mediante la expansión de las seis conformaciones canónicas del ciclohexano para nuestro sistema, se han obtenido 15 conformaciones expandidas que nos han proporcionado un diagrama teórico de rutas de interconversión.
2. Se han estudiado los compuestos quelato simétricos N-N, P-P, O-O y S-S para los metales níquel, paladio y platino, habiéndose obtenido los siguientes resultados:

<b>Compuestos Fragmentos</b>		
níquel	paladio	platino
<b>1300</b>	<b>114</b>	<b>97</b>
2582	198	136
<b>93</b>	<b>144</b>	<b>124</b>
164	184	175
<b>55</b>	<b>17</b>	<b>77</b>
128	18	86
<b>67</b>	<b>36</b>	<b>24</b>
114	64	38
TOTAL		
<b>1515</b>	<b>311</b>	<b>322</b>
2988	464	435

3. La aplicación del Método de Clasificación, con  $\sigma = 10^\circ$ , a todos los fragmentos confirma la validez del diagrama teórico obtenido para las 15 conformaciones.
4. El programa del Área de Química Inorgánica, que permite valorar la deformación de los fragmentos, coincide casi al 100% con el Método de Clasificación. El estudio de los datos y su comparación con los de otros Proyectos Fin de Carrera, permite afirmar que las conformaciones están poco deformadas.
5. Los resultados reflejados en los histogramas para los tres metales y para los cuatro tipos de quelato se pueden distribuir en tres grandes grupos:
  - [1] níquel, [1] paladio, [4] paladio y [4] platino,
  - [1] platino, [2] platino, [2] paladio, [4] níquel y [2] níquel,
  - [3] platino, [3] paladio y [3] níquel.

Estos datos permiten sugerir que el metal y el quelato influyen en la distribución de las diferentes conformaciones. Este resultado es similar al obtenido en otro Proyecto Fin de Carrera para los mismos metales pero con los sistemas quelato N-P, N-O, N-S, P-O, P-S y O-S.

6. Se han comparado los resultados de los 2582 fragmentos de diaminas de níquel con los 1816 fragmentos de diaminas de cobalto del PFC del año 2007:

Conformación	níquel		cobalto	
	Cantidad	%	Cantidad	%
<i>chair</i>	1572	<b>60.88</b>	766	<b>42.18</b>
<i>boat</i>	203	<b>7.86</b>	445	<b>24.50</b>
<i>twist-boat</i>	253	<b>9.80</b>	268	<b>14.76</b>
<i>envelope</i>	347	<b>13.44</b>	194	<b>10.68</b>
<i>half-chair</i>	130	<b>5.03</b>	75	<b>4.13</b>
<i>screw-boat</i>	77	<b>2.98</b>	68	<b>3.74</b>
Total	2582	<b>99.99</b>	1816	<b>99.99</b>

Los diferentes resultados sugieren que el tipo de metal influye en la distribución de las conformaciones.

7. La aplicación del método estadístico Jerárquico con Distinta Varianza a los compuestos de paladio con el quelato N,N (denominado [1] paladio), ha permitido la clasificación en *clusters* de sus 198 fragmentos, dando como resultado dos grandes *clusters*, uno con 114 datos con la conformación *chair* como más probable, y otro de 84 datos que, en sucesivas particiones, nos lleva a *clusters* con rutas HC→E y SB→E, confirmando el diagrama teórico en la distribución de conformaciones.
8. Los centroides de los diferentes *clusters* obtenidos en el estudio de los datos de quelatos N-N de paladio por el Método Jerárquico con Distinta Varianza aportan, también, información acerca de las diferentes rutas en las conformaciones del ciclohexano.