

---

**CAPÍTULO 15****“APÉNDICES”**

---

---

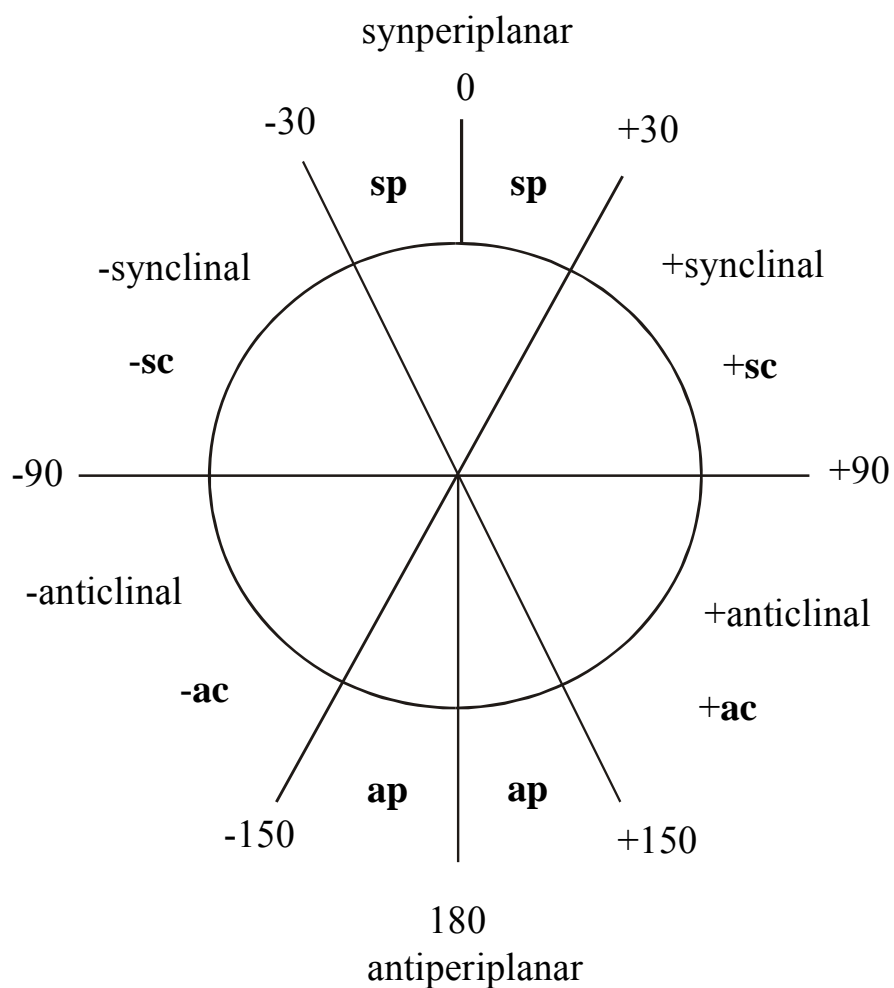
**15.1 APÉNDICE I (ÁNGULOS DIEDROS)****15.1.1 Definición y nomenclatura de ángulo diedro**

De acuerdo con las recomendaciones de la International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC,<sup>[1]</sup> en una cadena de átomos A–B–C–D se define como ángulo de torsión o ángulo diedro, al ángulo que existe entre el plano que contiene los átomos A, B y C y aquel que contiene a los átomos B, C y D. En una proyección de Newman, el ángulo de torsión es el ángulo entre los enlaces de dos grupos especificados, uno próximo al observador y el otro distante. De esta manera, el ángulo de torsión existente entre los grupos A y D se considera positivo si el enlace cercano A–B se encuentra rotado en una dirección siguiendo las agujas del reloj hasta un valor de 180°, mientras que un ángulo de torsión negativo requiere una rotación en el sentido inverso.

Los arreglos correspondientes a ángulos de torsión entre 0° y ± 90° son llamados *syn*, aquellos correspondientes a ángulos entre ± 90° y 180° son llamados *anti*. Similarmente, para ángulos de torsión comprendidos entre 30° y 150° ó entre – 30° y –150°, los arreglos moleculares se denominan *clinal*, y aquellos entre 0° y ±30° ó ±150° y 180°, se designan como *periplanar*. Los dos tipos de términos pueden combinarse de manera que definen cuatro rangos de ángulos de torsión, de 0° a ±30° *synperiplanar (sp)*; de 30° a 90° y de –30° a –90° *synclinal (sc)*, de 90° a 150° y de –90° a –150° *anticlinal (ac)* y de ±150° a 180° *antiperiplanar (ap)*. En la Figura 16.1 se muestra una proyección de Newman a lo largo del enlace B–C, con el enlace C–D alejado del observador y diferentes posiciones del enlace A–B, conjuntamente con las correspondientes definiciones y ángulos diedros.

Las conformaciones *synperiplanar* y *antiperiplanar* son también conocidas como conformaciones *syn* y *anti*, respectivamente, y las conformaciones definidas anteriormente como *synclinal* se conocen como *gauche*. Esta nomenclatura fue la utilizada mayormente a lo largo de la presente tesis doctoral. Para macromoléculas se

recomienda la utilización de los símbolos T, C, G<sup>+</sup>, G<sup>-</sup>, A<sup>+</sup> y A<sup>-</sup> (**ap**, **sp**, **+sc**, **-sc**, **+ac** y **-ac**, respectivamente).



**Figura 15.1** Proyección de Newman y definición de ángulos diedros recomendada por la IUPAC (tomado de la tesis doctoral de M. F. Erben)<sup>[2]</sup>

## **15.2 APÉNDICE II (ESTRUCTURAS CRISTALINAS)**

### **15.2.1 Datos Cristalográficos**

A continuación se muestran los datos cristalográficos resultantes del análisis estructural y del refinamiento de la estructura cristalina de todos los compuestos líquidos medidos utilizando la técnica de difracción de rayos X a bajas temperaturas y la técnica de difracción de rayos X de sólidos cristalinos.

En algunos casos se muestran en tablas los parámetros, como longitudes de enlace y ángulos de enlace para aquellas moléculas para las cuales en el análisis estructural solo se mostró algunos de estos parámetros.

15.2.1.1 CH<sub>3</sub>OC(O)SNCO

**Tabla 15.1** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura de CH<sub>3</sub>OC(O)SNCO

Empirical formula	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N O <sub>2</sub> S
Formula weight	133.12 Da
Density (calculated)	1.566 g cm <sup>-3</sup>
F(000)	408
Temperature	203(2) K
Crystal size	0.3 mm
Crystal color	colorless
Crystal description	cylindric
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	triclinic
Space group	<i>P</i> $\bar{1}$
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 8.292(6) Å <i>alpha</i> = 67.290(2) <i>b</i> = 9.839(7) Å <i>beta</i> = 71.557(10) <i>c</i> = 11.865(8) Å <i>gamma</i> = 83.485(10)
Volume	847.08(10) Å <sup>3</sup>
Z	6
Cell measurement reflections used	2470
Cell measurement theta min/max	2.36° to 28.26°
Diffractometer control software	Bruker AXS SMART Vers. 5.054 1997/98
Diffractometer measurement device	Siemens SMART CCD area detector system
Diffractometer measurement method	Data collection in omega at 0.3° scan width, one run with 740 frames, phi = 0°, chi = 0°
Theta range for data collection	2.24° to 28.31°
Completeness to theta = 28.31°	67.6%
Index ranges	-9 ≤ h ≤ 11   -13 ≤ k ≤ 12   -13 ≤ l ≤ 13
Computing data reduction	Bruker AXS SAINT program Vers. 6.02A
Absorption coefficient	0.486 mm <sup>-1</sup>
Computing absorption correction	Bruker AXS SADABS program multiscan V2.03
Absorption correction details	R.H. Blessing, Acta Cryst. (1995) A51, 33-38
Max / min transmission	1.00 / 0.90
R(mer) before/after correction	0.0211 / 0.0065
Computing structure solution	Bruker AXS SHEXTL Vers. 5.10 DOS/WIN95/NT
Computing structure refinement	Bruker AXS SHEXTL Vers. 5.10 DOS/WIN95/NT
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>
Reflections collected	2703
Independent reflections	1227 [R(int) = 0.0333]
Data / restraints / parameters	892 / 0 / 101
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.012
Weighting details	w = 1/[σ <sup>2</sup> (F <sub>o</sub> <sup>2</sup> ) + (0.1146*P) <sup>2</sup> ], where P = (F <sub>o</sub> <sup>2</sup> + 2F <sub>c</sub> <sup>2</sup> )/3
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0592   wR2 = 0.1474
R indices (all data)	R1 = 0.0787   wR2 = 0.1639
Extinction coefficient	0.003(5)

**Tabla 15.1** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y coeficientes de los desplazamientos isotrópicos equivalentes ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X a baja temperatura para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SNCO}$ .  
 $U(\text{eq})$  definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

	<b>x</b>	<b>y</b>	<b>z</b>	<b>U(eq)</b>
H(1A)	6691	-3391	7745	82
H(1B)	6492	-3684	9193	82
H(1C)	7905	-2571	8081	82
S(1)	4146(1)	657(1)	7348(1)	42(1)
O(1)	5549(2)	-1745(2)	8291(2)	47(1)
N(1)	4561(2)	1847(2)	5845(2)	43(1)
C(1)	2762(3)	-2948(2)	8330(2)	54(1)
O(2)	6750(1)	-591(1)	6168(1)	45(1)
C(2)	5723(2)	-693(2)	7169(2)	35(1)
C(3)	5627(2)	1891(2)	4874(2)	42(1)
O(3)	6562(2)	2098(2)	3870(2)	62(1)

**Tabla 15.2** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SNCO}$ . El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos toma la forma: –

$$2\pi^2 [ h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12} ]$$

	<b>U11</b>	<b>U22</b>	<b>U33</b>	<b>U23</b>	<b>U13</b>	<b>U12</b>
S(1)	44(1)	45(1)	36(1)	-17(1)	-11(1)	14(1)
O(1)	58(1)	42(1)	33(1)	-9(1)	-14(1)	17(1)
N(1)	47(1)	41(1)	35(2)	-10(1)	-14(1)	15(1)
C(1)	66(1)	43(1)	52(2)	-14(1)	-25(1)	22(1)
O(2)	42(1)	46(1)	39(1)	-15(1)	-8(1)	11(1)
C(2)	37(1)	35(1)	35(2)	-14(1)	-14(1)	5(1)
C(3)	47(1)	33(1)	45(2)	-13(1)	-17(1)	10(1)
O(3)	69(1)	50(1)	42(1)	-8(1)	-1(1)	14(1)

15.2.1.2  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}[(\text{CO})(\text{CO})\text{C}_6\text{H}_4]$ 

**Tabla 15.3** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}[(\text{CO})(\text{CO})\text{C}_6\text{H}_4]$

Empirical formula	$\text{C}_{10}\text{H}_7\text{NO}_4\text{S}$
Formula weight	237.23
Temperature	150(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	monoclinic, $P2_1/c$
Unit cell dimensions	a = 6.795(1) Å      alpha = 90° b = 5.109(1) Å      beta = 90.310(3)° c = 30.011(3) Å      gamma = 90°
Volume	1041.8(3) Å <sup>3</sup>
Z, Calculated density	4, 1.512 Mg/m <sup>3</sup>
Absorption coefficient	0.308 mm <sup>-1</sup>
F(000)	488
Crystal size	0.16 x 0.12 x 0.08 mm
Theta range for data collection	3.00 to 26.00°
Limiting indices	-5 ≤ h ≤ 8, -6 ≤ k ≤ 4, -27 ≤ l ≤ 36
Reflections collected / unique	3342 / 1889 [R(int)=0.07]
Completeness to theta = 26.00°	91.6 %
Max. and min. transmission	0.9758 and 0.9524
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>
Data / restraints / parameters	1889 / 0 / 146
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.052
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0453, wR2 = 0.1008
R indices (all data)	R1 = 0.0686, wR2 = 0.1151
Largest diff. peak and hole	0.223 and -0.335 e.Å <sup>-3</sup>

**Tabla 15.4** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y coeficientes de los desplazamientos isotrópicos equivalentes ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN}[(\text{CO})(\text{CO})\text{C}_6\text{H}_4]$ . U(eq) definido como un tercio de la traza del tensor Uij ortogonalizado

átomo	x	y	z	U(eq)
S	9950(1)	14714 (1)	1001(1)	35(1)
O(1)	11027(2)	11472 (4)	1837(1)	40(1)
O(2)	5995(2)	12064 (4)	816(1)	44(1)
O(3)	11044(3)	10275 (3)	610(1)	42(1)
O(4)	12017(2)	14126 (3)	308(1)	35(1)
N	8734(3)	12370 (4)	1280(1)	32(1)
C(1)	9471(3)	11031 (5)	1657(1)	31(1)
C(2)	7947(3)	9085 (5)	1774(1)	29(1)
C(3)	7899(4)	7314 (5)	2121(1)	35(1)
C(4)	6259(4)	5684 (5)	2147(1)	43(1)
C(5)	4739(4)	5836 (6)	1835(1)	43(1)
C(6)	4797(4)	7638 (5)	1488(1)	38(1)
C(7)	6421(3)	9257 (5)	1464(1)	30(1)
C(8)	6888(3)	11332 (5)	1139(1)	32(1)
C(9)	11120(3)	12616 (5)	604(1)	31(1)
C(10)	13010(4)	12720 (6)	-49(1)	41(1)

**Tabla 15.5** Coordenadas de hidrógeno ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópicos ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) para la  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN}[(\text{CO})(\text{CO})\text{C}_6\text{H}_4]$

átomo	x	y	z	U (eq)
H(3)	8938	7211	2333	42
H(4)	6177	4443	2382	52
H(5)	3644	4691	1860	52
H(6)	3758	7750	1276	46
H(10A)	12095	11469	-186	61
H(10B)	14148	11778	73	61
H(10C)	13454	13970	-275	61

**Tabla 15.6** Longitudes de enlace (Å) y ángulos de enlace (°) obtenidos por difracción de rayos X para la  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}[(\text{CO})(\text{CO})\text{C}_6\text{H}_4]$

S-N	1.682(2)
S-C(9)	1.792(3)
O(1)-C(1)	1.206(3)
O(2)-C(8)	1.199(3)
O(3)-C(9)	1.197(3)
O(4)-C(9)	1.326(3)
O(4)-C(10)	1.460(3)
N-C(1)	1.410(3)
N-C(8)	1.425(3)
C(1)-C(2)	1.480(3)
C(2)-C(3)	1.381(3)
C(2)-C(7)	1.392(3)
C(3)-C(4)	1.394(4)
C(4)-C(5)	1.391(4)
C(5)-C(6)	1.391(4)
C(6)-C(7)	1.382(3)
C(7)-C(8)	1.476(4)
N-S-C(9)	97.3(1)
C(9)-O(4)-C(10)	114.9(2)
C(1)-N-C(8)	111.5(2)
C(1)-N-S	124.9(2)
C(8)-N-S	123.4(2)
O(1)-C(1)-N	125.1(2)
O(1)-C(1)-C(2)	129.2(2)
N-C(1)-C(2)	105.7(2)
C(3)-C(2)-C(7)	121.7(2)
C(3)-C(2)-C(1)	129.7(2)
C(7)-C(2)-C(1)	108.6(2)
C(2)-C(3)-C(4)	117.1(2)
C(5)-C(4)-C(3)	121.4(3)
C(4)-C(5)-C(6)	121.1(3)
C(7)-C(6)-C(5)	117.5(3)
C(6)-C(7)-C(2)	121.3(2)
C(6)-C(7)-C(8)	129.8(2)
C(2)-C(7)-C(8)	109.0(2)
O(2)-C(8)-N	124.5(2)
O(2)-C(8)-C(7)	130.3(2)
N-C(8)-C(7)	105.2(2)
O(3)-C(9)-O(4)	127.7(3)
O(3)-C(9)-S	124.6(2)
O(4)-C(9)-S	107.7(2)



15.2.1.3 CH<sub>3</sub>OC(O)SSCF<sub>3</sub>**Tabla 15.7** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura de CH<sub>3</sub>OC(O)SSCF<sub>3</sub>

Empirical formula	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub>
Formula weight	192.17 Da
Density (calculated)	1.765 g cm <sup>-3</sup>
F(000)	384
Temperature	190(2) K
Crystal size	0.3 mm diameter
Crystal color	colorless
Crystal description	cylindric
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	triclinic
Space group	<i>P</i> $\bar{1}$
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 6.4698(5) Å $\alpha$ = 97.219(6)° <i>b</i> = 9.0499(8) Å $\beta$ = 93.131(5)° <i>c</i> = 12.5700(11) Å $\gamma$ = 96.888(5)°
Volume	723.07(11) Å <sup>3</sup>
Z	4
Cell measurement reflections used	9901
Cell measurement theta min/max	2.28° to 27.03°
Diffraction control software	Bruker AXS APEX 2 Vers. 2.0-2 2006
Diffraction measurement device	Siemens SMART three axis goniometer with APEX II area detector system
Diffraction measurement method	Data collection strategy APEX 2/COSMO chi + / - 10°
Theta range for data collection	1.64° to 27.90°
Completeness to theta = 27.90°	76.2 %
Index ranges	-5 ≤ <i>h</i> ≤ 5, -11 ≤ <i>k</i> ≤ 11, 0 ≤ <i>l</i> ≤ 16
Computing data reduction	Bruker AXS APEX 2 Vers. 2.0-2 2006
Absorption coefficient	0.730 mm <sup>-1</sup>
Empirical absorption correction	Bruker AXS TWINABS Vers. 1.05
Max. / min. transmission	0.97 / 0.81
R(merg) before/after correction	0.0534 / 0.0509
Computing structure solution	Bruker AXS SHELXTL Vers. 6.12 W95/98/NT/2000/ME
Computing structure refinement	Bruker AXS SHELXTL Vers. 6.12 W95/98/NT/2000/ME
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>
Reflections collected	36644
Independent reflections	7516 [ <i>R</i> (int) = 0.069]
Data / restraints / parameters	5296 / 0 / 184
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.031
Weighting details	$w = 1/[\sigma^2 (F_o^2) + (0.1365 * P)^2 + 0.2533 * P]$ where $P = (F_o^2 + 2F_c^2) / 3$
Final R indices [ <i>I</i> > 2σ( <i>I</i> )]	<i>R</i> 1 = 0.0631, <i>wR</i> 2 = 0.1900
R indices (all data)	<i>R</i> 1 = 0.0887, <i>wR</i> 2 = 0.2186
Extinction coefficient	0.004(5)
Largest diff. peak and hole	0.563 and -0.357 eÅ <sup>-3</sup>

**Tabla 15.8** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópico equivalente ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SSCF}_3$ .  $U(\text{eq})$  está definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

	x	y	z	U(eq)
S11	2060(2)	2230(1)	6248(1)	45(1)
S21	-1058(2)	2159(1)	6255(1)	47(1)
O11	-716(4)	1558(3)	4130(2)	52(1)
O21	-3897(5)	1672(2)	4771(2)	48(1)
C11	2795(7)	4205(4)	6213(3)	52(1)
C21	-1850(7)	1741(3)	4838(2)	40(1)
C31	-4915(7)	1387(4)	3692(3)	57(1)
F11	2176(5)	5056(3)	7044(2)	94(1)
F21	2056(4)	4669(3)	5336(2)	91(1)
F31	4852(4)	4463(3)	6252(2)	73(1)
S12	3799(2)	8330(1)	1004(1)	45(1)
S22	6860(2)	8198(1)	880(1)	45(1)
O12	5730(4)	8116(2)	-1219(2)	48(1)
O22	9108(5)	8059(3)	-679(2)	54(1)
C12	2788(6)	6365(3)	867(3)	46(1)
C22	7096(7)	8113(3)	-553(2)	42(1)
C32	9717(7)	7959(5)	-1781(3)	63(1)
F12	795(4)	6279(2)	1114(2)	64(1)
F22	2824(4)	5674(2)	-128(2)	67(1)
F32	3755(4)	5597(2)	1511(2)	72(1)

**Tabla 15.9** Coordenadas de hidrógeno ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópicos ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SSCF}_3$

	x	y	z	U(eq)
H3A1	-4359	2134	3262	85
H3B1	-6387	1427	3744	85
H3C1	-4697	408	3358	85
H3A2	8861	7130	-2209	94
H3B2	11158	7792	-1787	94
H3C2	9546	8871	-2078	94

**Tabla 15.10** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el CH<sub>3</sub>OC(O)SNCO. El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos toma la forma:  $-2\pi^2$

$$[h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
S11	39(1)	51(1)	47(1)	10(1)	-1(1)	11(1)
S21	40(1)	67(1)	33(1)	5(1)	7(1)	4(1)
O11	46(2)	73(1)	36(1)	-2(1)	8(1)	9(1)
O21	34(2)	65(1)	43(1)	4(1)	1(1)	3(1)
C11	34(3)	55(2)	68(2)	11(2)	-1(2)	7(2)
C21	45(3)	41(1)	34(1)	5(1)	4(1)	2(1)
C31	54(3)	65(2)	48(2)	5(1)	-8(2)	1(2)
F11	83(2)	66(1)	126(2)	-23(1)	29(2)	8(1)
F21	78(2)	78(2)	121(2)	58(2)	-27(2)	-8(1)
F31	43(2)	78(1)	92(2)	6(1)	-1(1)	-3(1)
S12	43(1)	42(1)	50(1)	0(1)	9(1)	10(1)
S22	38(1)	61(1)	34(1)	4(1)	0(1)	1(1)
O12	45(2)	62(1)	37(1)	8(1)	-4(1)	7(1)
O22	34(2)	84(2)	45(1)	14(1)	7(1)	10(1)
C12	35(3)	48(2)	52(2)	2(1)	5(2)	3(1)
C22	50(3)	39(1)	38(2)	7(1)	3(2)	5(1)
C32	54(3)	84(2)	52(2)	8(2)	20(2)	6(2)
F12	34(2)	76(1)	80(2)	7(1)	10(1)	0(1)
F22	67(2)	61(1)	66(1)	-17(1)	11(1)	-4(1)
F32	62(2)	63(1)	95(2)	35(1)	-4(1)	9(1)

15.2.1.4  $[CH_3OC(O)SN(H)]_2CO$ **Tabla 15.11** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura de la  $[CH_3OC(O)SN(H)]_2C=O$ 

Empirical formula	$C_5H_8N_2O_5S_2$
Formula weight	480.51
Temperature (K)	296(2)
Crystal system, space group	Orthorhombic, $P2_12_12$
Unit cell dimensions: <sup>a</sup>	
a [Å]	9.524(2)
b [Å]	12.003(1)
c [Å]	4.481(1)
Volume (Å <sup>3</sup> )	512.3(1)
Z, Calculated density (Mg/m <sup>3</sup> )	2, 1.558
Absorption coefficient (mm <sup>-1</sup> )	0.519
F(000)	248
Crystal size (mm)	0.16 x 0.04 x 0.04
Crystal color / shape	Colorless / prism
θ-range for data collection (°)	2.73 to 24.98
Limiting indices	$-10 \leq h \leq 11, -14 \leq k \leq 14, -5 \leq l \leq 4$
Reflections collected / unique	3215 / 906 [R(int)=0.037]
Observed [ $I > 2\sigma(I)$ ]	838
Completeness to $\theta = 24.98^\circ$ (%)	99.3
Max. and min. transmission	0.980 and 0.922
Weights, w	$[\sigma^2(F_o^2) + (0.0475P)^2 + 0.03P]^{-1}$ , $P = [\text{Max}(F_o^2, 0) + 2F_c^2]/3$
Data/restraints/parameters	906 / 0 / 7
Goodness-of-fit on $F^2$	1.086
Final R indices <sup>b</sup> [ $I > 2\sigma(I)$ ]	$R1=0.0289, wR2=0.0750$
R indices (all data)	$R1=0.0318, wR2=0.0775$
Absolute structure parameter	0.04(10)
Extinction coefficient	0.06(1)
Largest diff. peak and hole (e-Å <sup>-3</sup> )	0.178 and -0.166

<sup>a</sup> Least-squares refinement of the angular settings for 3215 reflections in the  $2.73 < \theta < 24.98^\circ$  range.

<sup>b</sup> R-indices defined as:  $R_1 = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$ ,  $wR_2 = [\sum w(F_o^2 - F_c^2)^2 / \sum w(F_o^2)^2]^{1/2}$ .

**Tabla 15.12** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópico equivalente ( $\text{Å}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para la  $[\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})]_2\text{C}=\text{O}$ .  $U(\text{eq})$  está definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

átomo <sup>a</sup>	x	y	z	U(eq)
S(1)	2754(1)	-266(1)	914(1)	50(1)
O(3)	0	0	3605(5)	57(1)
O(4)	4266(2)	1167(1)	3469(5)	60(1)
O(5)	2437(2)	1935(1)	1037(5)	66(1)
N(6)	1202(2)	-114(2)	-753(4)	45(1)
C(2)	0	0	877(7)	41(1)
C(7)	3112(2)	1154(2)	1785(5)	45(1)
C(8)	4762(3)	2247(2)	4462(8)	73(1)

<sup>a</sup> Para la numeración atómica ver Figura 11.5 (Capítulo 11).

**Tabla 15.13** Coordenadas de hidrógeno ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópicos ( $\text{Å}^2 \times 10^3$ ) para la  $[\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})]_2\text{C}=\text{O}$

átomo	x	y	z	U(eq)
H(6)	1157	-107	-2670	54
H(8A)	5113	2659	2784	110
H(8B)	5500	2148	5896	110
H(8C)	4001	2650	5364	110

**Tabla 15.14** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SNCO}$ . El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos toma la forma:  $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

átomo	U11	U22	U33	U23	U13	U12
S(1)	39(1)	53(1)	57(1)	-3(1)	-8(1)	1(1)
O(3)	48(1)	95(2)	28(1)	0	0	-2(1)
O(4)	47(1)	52(1)	82(1)	-8(1)	-18(1)	-2(1)
O(5)	60(1)	59(1)	80(1)	4(1)	-11(1)	12(1)
N(6)	35(1)	71(1)	31(1)	-3(1)	-1(1)	-1(1)
C(2)	40(2)	51(2)	31(1)	0	0	-5(1)

15.2.1.5  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{HC}(\text{O})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{CH}_3)_3)$ **Tabla 15.15** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura de la  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{HC}(\text{O})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{CH}_3)_3)$ 

Empirical formula	C9 H18 N2 O4 S	
Formula weight	250.31	
Temperature	130(2) K	
Wavelength	71.073 pm	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/n	
Unit cell dimensions	a = 1028.72(9) pm	$\alpha = 90^\circ$
	b = 936.48(5) pm	$\beta = 90.010(7)^\circ$
	c = 2657.7(2) pm	$\gamma = 90^\circ$
Volume	2.5604(3) nm <sup>3</sup>	
Z	8	
Density (calculated)	1.299 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.255 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	1072	
Crystal size	0.8 x 0.02 x 0.02 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.66 to 25.35°	
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 11, -11 ≤ k ≤ 11, -32 ≤ l ≤ 27	
Reflections collected	21126	
Independent reflections	4686 [R(int) = 0.0792]	
Completeness to theta = 25.35°	99.9 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.88981	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	4686 / 0 / 422	
Goodness-of-fit on F2	0.859	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0434, wR2 = 0.0660	
R indices (all data)	R1 = 0.1116, wR2 = 0.0777	
Largest diff. peak and hole	0.253 and -0.243 e.Å <sup>-3</sup>	

**Tabla 15.16** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópico equivalente ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para la  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN(H)C(O)N(H)C(CH}_3)_3$ .  $U(\text{eq})$  está definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

	x	y	z	U(eq)
C(1)	4776(3)	6525(3)	4427(1)	23(1)
C(2)	3117(4)	6155(5)	5030(1)	41(1)
C(3)	7626(3)	6236(3)	3773(1)	20(1)
C(4)	10064(3)	6334(3)	3791(1)	21(1)
C(5)	10311(3)	5456(4)	3318(1)	31(1)
C(6)	10226(3)	5433(4)	4260(1)	29(1)
C(7)	11016(3)	7578(4)	3810(2)	32(1)
C(8)	10220(3)	1525(3)	4427(1)	24(1)
C(9)	11877(4)	1148(4)	5029(1)	39(1)
C(10)	7373(3)	1225(3)	3773(1)	21(1)
C(11)	4934(3)	1328(3)	3792(1)	23(1)
C(12)	4695(3)	454(4)	3317(1)	29(1)
C(13)	4767(3)	424(3)	4262(1)	28(1)
C(14)	3990(3)	2577(4)	3807(2)	32(1)
C(20)	9231(3)	-407(4)	2498(1)	40(1)
C(21)	7800(3)	-260(4)	2500(1)	50(1)
C(22)	11259(3)	792(3)	2502(2)	37(1)
C(23)	11750(4)	2282(4)	2498(2)	44(1)
N(1)	6533(2)	7074(3)	3729(1)	26(1)
N(2)	8745(2)	6942(3)	3779(1)	25(1)
N(3)	8464(2)	2087(3)	3730(1)	24(1)
N(4)	6253(2)	1961(3)	3780(1)	23(1)
O(1)	5525(2)	6963(2)	4732(1)	34(1)
O(2)	3578(2)	6051(2)	4514(1)	30(1)
O(3)	7533(2)	4917(2)	3795(1)	25(1)
O(4)	9472(2)	1959(2)	4732(1)	33(1)
O(5)	11419(2)	1045(2)	4514(1)	30(1)
O(6)	7467(2)	-86(2)	3793(1)	25(1)
O(10)	9806(2)	-1542(2)	2502(1)	71(1)
O(11)	9855(2)	842(2)	2501(1)	40(1)
S(1)	5048(1)	6423(1)	3768(1)	25(1)
S(2)	9952(1)	1422(1)	3769(1)	26(1)

**Tabla 15.17** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para la CH<sub>3</sub>OC(O)SN(H)C(O)N(H)C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>. El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos

toma la forma:  $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U <sup>11</sup>	U <sup>22</sup>	U <sup>33</sup>	U <sup>23</sup>	U <sup>13</sup>	U <sup>12</sup>
C(1)	26(2)	13(1)	31(2)	-2(1)	-4(1)	4(1)
C(2)	37(2)	56(3)	30(2)	-4(2)	7(2)	3(2)
C(3)	23(2)	20(2)	16(2)	-2(1)	1(1)	1(1)
C(4)	20(2)	17(2)	27(2)	-3(2)	2(1)	1(1)
C(5)	29(2)	31(2)	34(2)	0(2)	7(2)	0(2)
C(6)	29(2)	21(2)	36(2)	-1(2)	-4(2)	2(2)
C(7)	26(2)	28(2)	43(3)	1(2)	-4(2)	-1(2)
C(8)	28(2)	12(1)	34(2)	0(1)	5(1)	-4(1)
C(9)	32(2)	53(3)	33(2)	-5(2)	-8(2)	-1(2)
C(10)	24(2)	22(2)	17(2)	-2(1)	-4(1)	-1(1)
C(11)	19(2)	18(2)	32(2)	1(2)	-1(1)	2(1)
C(12)	33(2)	28(2)	26(2)	-2(2)	-6(2)	-2(2)
C(13)	33(2)	21(2)	30(2)	-2(2)	6(2)	-2(2)
C(14)	25(2)	28(2)	43(3)	3(2)	0(2)	1(2)
C(20)	51(2)	42(2)	29(2)	-4(2)	0(2)	-2(2)
C(21)	37(2)	79(2)	33(2)	-2(2)	1(2)	-8(2)
C(22)	36(2)	43(2)	33(2)	0(2)	1(2)	10(2)
C(23)	48(3)	42(2)	42(3)	-4(2)	-3(2)	7(2)
N(1)	22(2)	14(1)	42(2)	-1(1)	2(1)	-3(1)
N(2)	26(2)	11(1)	37(2)	2(1)	2(1)	-1(1)
N(3)	22(2)	10(1)	41(2)	2(1)	-1(1)	4(1)
N(4)	24(2)	10(1)	36(2)	2(1)	-1(1)	1(1)
O(1)	31(1)	36(1)	35(1)	-7(1)	-9(1)	-4(1)
O(2)	24(1)	39(1)	27(1)	-4(1)	4(1)	-3(1)
O(3)	26(1)	11(1)	37(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
O(4)	29(1)	34(1)	35(1)	-7(1)	7(1)	4(1)
O(5)	24(1)	38(1)	26(1)	-3(1)	-3(1)	5(1)
O(6)	27(1)	13(1)	33(1)	0(1)	-1(1)	1(1)
O(10)	69(2)	44(1)	98(2)	0(2)	1(1)	-2(1)
O(11)	38(2)	44(1)	38(1)	0(1)	0(1)	6(1)
S(1)	24(1)	22(1)	29(1)	-2(1)	0(1)	-3(1)
S(2)	22(1)	23(1)	31(1)	-2(1)	1(1)	2(1)



15.2.1.6  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{HC}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3)$ **Tabla 15.18** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$ 

Empirical formula	C7 H13 N O4 S	
Formula weight	207.24	
Temperature	130(2) K	
Wavelength	71.073 pm	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	P2(1)/c	
Unit cell dimensions	a = 1105.67(5) pm b = 1027.23(3) pm c = 965.30(3) pm	a = 90° b = 111.252(4)° g = 90°
Volume	1.02181(6) nm <sup>3</sup>	
Z	4	
Density (calculated)	1.347 Mg/m <sup>3</sup>	
Absorption coefficient	0.302 mm <sup>-1</sup>	
F(000)	440	
Crystal size	0.3 x 0.1 x 0.01 mm <sup>3</sup>	
Theta range for data collection	2.80 to 26.37°	
Index ranges	-13 ≤ h ≤ 12, -12 ≤ k ≤ 12, -12 ≤ l ≤ 12	
Reflections collected	9912	
Independent reflections	2090 [R(int) = 0.0674]	
Completeness to theta = 26.37°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	1 and 0.91908	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>	
Data / restraints / parameters	2090 / 0 / 170	
Goodness-of-fit on F2	0.838	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0366, wR2 = 0.0516	
R indices (all data)	R1 = 0.0850, wR2 = 0.0582	
Largest diff. peak and hole	0.352 and -0.220 e.Å <sup>-3</sup>	

**Tabla 15.19** Longitudes de enlace (pm) y ángulos de enlace (°) obtenidos por difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$

S(1)-N(1)	166.42(18)
S(1)-C(1)	176.9(2)
O(1)-C(1)	119.2(2)
O(2)-C(1)	133.3(2)
O(2)-C(2)	145.4(2)
O(3)-C(3)	121.0(2)
O(4)-C(3)	133.0(2)
O(4)-C(4)	149.2(2)
N(1)-C(3)	136.5(2)
N(1)-H(1N)	80.6(18)
C(2)-H(2A)	96(2)
C(2)-H(2B)	93(2)
C(2)-H(2C)	97(2)
C(4)-C(7)	150.7(3)
C(4)-C(6)	150.8(3)
C(4)-C(5)	151.1(3)
C(5)-H(5A)	102.1(19)
C(5)-H(5B)	94(2)
C(5)-H(5C)	97.0(18)
C(6)-H(6A)	101(2)
C(6)-H(6B)	97(2)
C(6)-H(6C)	93.9(18)
C(7)-H(7A)	96(2)
C(7)-H(7B)	97.0(19)
C(7)-H(7C)	98.3(19)
N(1)-S(1)-C(1)	99.91(9)
C(1)-O(2)-C(2)	115.62(17)
C(3)-O(4)-C(4)	121.25(13)
C(3)-N(1)-S(1)	122.14(15)
C(3)-N(1)-H(1N)	119.2(15)
S(1)-N(1)-H(1N)	116.4(15)
O(1)-C(1)-O(2)	126.04(19)
O(1)-C(1)-S(1)	125.83(17)
O(2)-C(1)-S(1)	108.12(14)
O(2)-C(2)-H(2A)	105.9(13)
O(2)-C(2)-H(2B)	107.4(13)
H(2A)-C(2)-H(2B)	115.1(19)
O(2)-C(2)-H(2C)	111.9(12)
H(2A)-C(2)-H(2C)	107.1(17)
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5(19)
O(3)-C(3)-O(4)	127.03(19)

---

O(3)-C(3)-N(1)	124.0(2)
O(4)-C(3)-N(1)	108.97(16)
O(4)-C(4)-C(7)	109.82(17)
O(4)-C(4)-C(6)	101.74(16)
C(7)-C(4)-C(6)	111.55(19)
O(4)-C(4)-C(5)	109.24(17)
C(7)-C(4)-C(5)	112.58(18)
C(6)-C(4)-C(5)	111.37(19)
C(4)-C(5)-H(5A)	112.9(10)
C(4)-C(5)-H(5B)	106.1(12)
H(5A)-C(5)-H(5B)	105.5(17)
C(4)-C(5)-H(5C)	113.0(11)
H(5A)-C(5)-H(5C)	109.0(15)
H(5B)-C(5)-H(5C)	110.0(16)
C(4)-C(6)-H(6A)	110.3(12)
C(4)-C(6)-H(6B)	110.7(12)
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.6(17)
C(4)-C(6)-H(6C)	110.4(12)
H(6A)-C(6)-H(6C)	111.0(16)
H(6B)-C(6)-H(6C)	106.8(16)
C(4)-C(7)-H(7A)	106.4(12)
C(4)-C(7)-H(7B)	111.4(11)
H(7A)-C(7)-H(7B)	110.9(16)
C(4)-C(7)-H(7C)	111.5(11)
H(7A)-C(7)-H(7C)	109.6(16)
H(7B)-C(7)-H(7C)	107.1(16)

---

**Tabla 15.20** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópico equivalente ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN(H)C(O)OC(CH}_3)_3$ .  $U(\text{eq})$  está definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

	x	y	z	U(eq)
S(1)	8139(1)	662(1)	5063(1)	29(1)
O(1)	5719(1)	1170(1)	3303(1)	34(1)
O(2)	6187(1)	-821(1)	4334(1)	30(1)
O(3)	7959(1)	3157(1)	6516(1)	32(1)
O(4)	8049(1)	4310(1)	4546(1)	24(1)
N(1)	8270(2)	2188(2)	4553(2)	27(1)
C(1)	6465(2)	397(2)	4076(2)	26(1)
C(2)	4884(2)	-1265(3)	3459(3)	36(1)
C(3)	8068(2)	3232(2)	5316(2)	24(1)
C(4)	7962(2)	5622(2)	5164(2)	25(1)
C(5)	9128(2)	5830(3)	6570(2)	32(1)
C(6)	8000(3)	6505(2)	3933(3)	34(1)
C(7)	6698(2)	5747(3)	5413(3)	31(1)

**Tabla 15.21** Coordenadas de hidrógeno ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópicos ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN(H)C(O)OC(CH}_3)_3$

	x	y	z	U(eq)
H(1N)	8251(18)	2289(19)	3720(20)	28(7)
H(2A)	4880(20)	-1400(20)	2480(20)	50(7)
H(2B)	4720(20)	-2000(20)	3920(20)	52(8)
H(2C)	4236(19)	-610(20)	3390(20)	38(6)
H(5A)	9989(18)	5708(19)	6418(18)	35(6)
H(5B)	9108(18)	6710(20)	6820(20)	36(6)
H(5C)	9122(17)	5280(18)	7384(19)	26(6)
H(6A)	8840(20)	6380(20)	3760(20)	56(7)
H(6B)	7954(19)	7410(20)	4190(20)	41(7)
H(6C)	7281(19)	6349(18)	3060(20)	32(6)
H(7A)	6662(19)	6630(20)	5740(20)	42(7)
H(7B)	6646(17)	5128(19)	6150(20)	28(6)
H(7C)	5950(19)	5582(19)	4500(20)	39(6)

**Tabla 15.22** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{OC(O)SN(H)C(O)OC(CH}_3)_3$ . El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos

toma la forma:  $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
S(1)	31(1)	26(1)	26(1)	2(1)	5(1)	0(1)
O(1)	36(1)	28(1)	31(1)	7(1)	4(1)	4(1)
O(2)	33(1)	19(1)	32(1)	1(1)	6(1)	-2(1)
O(3)	50(1)	34(1)	17(1)	1(1)	18(1)	0(1)
O(4)	33(1)	21(1)	20(1)	-1(1)	12(1)	-1(1)
N(1)	41(1)	24(1)	17(1)	0(1)	13(1)	-5(1)
C(1)	35(1)	26(1)	19(1)	-1(1)	11(1)	1(1)
C(2)	38(2)	28(2)	38(2)	-4(1)	9(1)	-7(1)
C(3)	21(1)	27(1)	20(1)	-3(1)	4(1)	-2(1)
C(4)	28(1)	21(1)	24(1)	-3(1)	10(1)	0(1)
C(5)	31(1)	30(2)	32(1)	-7(1)	10(1)	-4(1)
C(6)	41(2)	27(2)	37(1)	5(1)	18(1)	1(1)
C(7)	27(1)	36(2)	31(1)	0(1)	11(1)	2(1)

15.2.1.7 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

**Tabla 15.23** Datos cristalográficos del análisis estructural y refinamiento de la estructura del CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

Empirical formula	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub> S
Formula weight	163.19
Temperature	150(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Monoclinic, P2 <sub>1</sub> /n
Unit cell dimensions	a= 4.088(1) Å alpha=90° b=22.346(1) Å beta=100.687(3)° c= 8.284(1) Å gamma=90°
Volume	743.7(2) Å <sup>3</sup>
Z, Calculated density	4, 1.458 Mg/m <sup>3</sup>
Absorption coefficient	0.383 mm <sup>-1</sup>
F(000)	344
Crystal size	0.195 x 0.162 x 0.143 mm
Theta range for data collection	2.66 to 25.99°
Limiting indices	-4≤h≤5, -27≤k≤25, -8≤l≤10
Reflections collected / unique	4183 / 1422 [R(int)=0.0442]
Completeness to theta=25.99°	97.9 %
Refinement method	Full-matrix least-squares on F <sup>2</sup>
Data / restraints / parameters	1422 / 0 / 93
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.109
Final R indices [I>2σ(I)]	R1 <sup>a</sup> = 0.0324, wR2 <sup>b</sup> = 0.0906
R indices (all data)	R1 = 0.0355, wR2 = 0.0923
Largest diff. peak and hole	0.318 and -0.303 e.Å <sup>-3</sup>

$$^a R_1 = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|}, \quad ^b wR_2 = \left[ \frac{\sum w(|F_o|^2 - |F_c|^2)^2}{\sum w(|F_o|^2)^2} \right]^{1/2}$$

**Tabla 15.24** Coordenadas atómicas ( $\times 10^4$ ) y coeficientes de los desplazamientos isotrópicos equivalentes ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{-O-(C=O)-NH-(C=S)-O-CH}_2\text{-CH}_3$ .  $U(\text{eq})$  definido como un tercio de la traza del tensor  $U_{ij}$  ortogonalizado

átomo	x	y	z	U(eq)
S	7355(1)	-98(1)	7893(1)	24(1)
O(1)	4039(3)	1552(1)	10927(1)	29(1)
O(2)	5824(4)	1915(1)	8699(2)	33(1)
O(3)	8051(3)	1031(1)	7038(1)	23(1)
N	5862(3)	898(1)	9300(2)	23(1)
C(1)	3348(5)	2161(1)	11372(2)	31(1)
C(2)	5299(4)	1507(1)	9546(2)	22(1)
C(3)	7112(4)	638(1)	8048(2)	20(1)
C(4)	9210(4)	806(1)	5582(2)	24(1)
C(5)	10220(5)	1348(1)	4709(2)	31(1)

**Tabla 15.25** Parámetros de desplazamiento anisotrópico obtenidos del análisis de difracción de rayos X para el  $\text{CH}_3\text{-O-(C=O)-NH-(C=S)-O-CH}_2\text{-CH}_3$ . El factor exponencial de los desplazamientos anisotrópicos toma la forma:  $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

átomo	U11	U22	U33	U23	U13	U12
S	32(1)	18(1)	25(1)	-1(1)	7(1)	1(1)
O(1)	48(1)	16(1)	28(1)	0(1)	19(1)	2(1)
O(2)	53(1)	19(1)	33(1)	2(1)	22(1)	0(1)
O(3)	31(1)	20(1)	21(1)	0(1)	11(1)	-1(1)
N	34(1)	16(1)	21(1)	1(1)	11(1)	0(1)
C(1)	46(1)	18(1)	33(1)	-3(1)	19(1)	2(1)
C(2)	26(1)	19(1)	22(1)	-2(1)	7(1)	-1(1)
C(3)	20(1)	21(1)	19(1)	-1(1)	1(1)	-1(1)
C(4)	29(1)	23(1)	20(1)	-4(1)	8(1)	2(1)
C(5)	41(1)	27(1)	28(1)	1(1)	16(1)	4(1)

**Tabla 15.26** Coordenadas de hidrógeno ( $\times 10^4$ ) y parámetros de desplazamiento isotrópicos ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) para el  $\text{CH}_3\text{-O-(C=O)-NH-(C=S)-O-CH}_2\text{-CH}_3$

Atom	x	y	z	U(eq)
H(1)	5347	652	10043	27
H(1A)	1848	2351	10456	46
H(1B)	5435	2387	11619	46
H(1C)	2294	2156	12342	46
H(4A)	7407	585	4860	28
H(4B)	11128	533	5904	28
H(5A)	12030	1557	5432	46
H(5B)	8309	1617	4420	46
H(5C)	10979	1221	3707	46

### 15.3 APÉNDICE III (PARÁMETROS DE MEDICIÓN GC-MS DE LOS DIFERENTES COMPUESTOS Y ESPECTROS DE MASAS)

En este Apéndice se muestran los parámetros de medición empleados en el GC-MS para los diferentes compuestos y los espectros de masas de algunos de los compuestos estudiados en este trabajo.

#### 15.3.1 Parámetros de medición en el GC-MS de los diferentes compuestos

Los parámetros de medición en la mayoría de los casos difieren, siendo en otros casos iguales para compuestos análogos.

##### 15.3.1.1 $CH_3OC(O)S[N(CO)(CO)C_6H_4]$

**Tabla 15.27** Condiciones de medida empleados para la especie  $CH_3OC(O)S[N(CO)(CO)C_6H_4]$

Fase móvil:	He	
Columna:	1909 J-433 HP-5	
Longitud:	30 m	
Diámetro interno:	0,25 mm	
Relleno:	0,25 $\mu$ m	
Volumen de inyección:	1 $\mu$ l	
Temperatura del horno:	70 °C	
Temperatura de inyección:	200 °C	
Modo de inyección:	Split	
Modo de control de flujo:	presión	
Presión:	120 KPa	
Flujo total:	34,0 ml/min	
Flujo de la columna:	1,48 ml/min	
Velocidad lineal:	45.6 cm/s	
Flujo de la purga:	3 ml/min	
Relación de Split:	20,0	
Programa de temperatura del horno:		
Velocidad (°C/min)	Temperatura °C	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
7	250	2
25	300	3
Programa de presión:		
Velocidad (kPa/min)	Temperatura (kPa)	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
7	250	2
Temperatura de la fuente de iones:	200 °C	
Temperatura de la interfase:	250 °C	
Tiempo de corte del solvente:	5 min	
Potencial de ionización:	70 eV	



15.3.1.2  $CH_3OC(O)SSCN$ **Tabla 15.28** Condiciones de medida empleados para la especie  $CH_3OC(O)SSCN$ 

Fase móvil:	He
Columna:	1909 J-433 HP-5
Longitud:	30 m
Diámetro interno:	0,25 mm
Relleno:	0,25 $\mu$ m
Volumen de inyección:	1 $\mu$ l
Temperatura del horno:	70 °C
Temperatura de inyección:	200 °C
Modo de inyección:	Split
Modo de control de flujo:	presión
Presión:	100 KPa
Flujo total:	31,0 ml/min
Flujo de la columna:	1,33 ml/min
Velocidad lineal:	43 cm/s
Flujo de la purga:	3 ml/min
Relación de Split:	20,0

Programa de temperatura del horno:

Velocidad (°C/min)	Temperatura °C	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
5	200	2
15	250	1

Programa de presión:

Velocidad (kPa/min)	Temperatura (kPa)	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
5	200	2

Temperatura de la fuente de de iones:	200 °C
Temperatura de la interface:	250 °C
Tiempo de corte del solvente:	5 min
Potencial de ionización:	70 eV

15.3.1.3  $CH_3OC(O)SSC(O)CH_3$

**Tabla 15.29** Condiciones de medida empleados para la especie  $CH_3OC(O)SSC(O)CH_3$

Fase móvil:	He
Columna:	1909 J-433 HP-5
Longitud:	30 m
Diámetro interno:	0,25 mm
Relleno:	0,25 $\mu$ m
Volumen de inyección:	1,5 $\mu$ l
Temperatura del horno:	70 °C
Temperatura de inyección:	250 °C
Modo de inyección:	Split
Modo de control de flujo:	presión
Presión:	100 KPa
Flujo total:	31,0 ml/min
Flujo de la columna:	1,33 ml/min
Velocidad lineal:	43 cm/s
Flujo de la purga:	3 ml/min
Relación de Split:	20,0

Programa de temperatura del horno:

Velocidad (°C/min)	Temperatura °C	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
10	250	2
20	300	2

Programa de presión:

Velocidad (kPa/min)	Temperatura (kPa)	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
10	250	2

Temperatura de la fuente de de iones:	200 °C
Temperatura de la interface:	250 °C
Tiempo de corte del solvente:	5 min
Potencial de ionización:	70 eV

15.3.1.4  $CH_3OC(O)SSC(O)CF_3$ **Tabla 15.30** Condiciones de medida empleados para la especie  $CH_3OC(O)SSC(O)CF_3$ 

Fase móvil:	He
Columna:	1909 J-433 HP-5
Longitud:	30 m
Diámetro interno:	0,25 mm
Relleno:	0,25 $\mu$ m
Volumen de inyección:	1,0 $\mu$ l
Temperatura del horno:	70 °C
Temperatura de inyección:	200 °C
Modo de inyección:	Split
Modo de control de flujo:	presión
Presión:	100 KPa
Flujo total:	31,0 ml/min
Flujo de la columna:	1,33 ml/min
Velocidad lineal:	43 cm/s
Flujo de la purga:	3 ml/min
Relación de Split:	20,0

Programa de temperatura del horno:

Velocidad (°C/min)	Temperatura °C	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
10	250	2
20	300	2

Programa de presión:

Velocidad (kPa/min)	Temperatura (kPa)	Tiempo sostenido (min)
-	70	2
10	200	2

Temperatura de la fuente de de iones:	200 °C
Temperatura de la interface:	250 °C
Tiempo de corte del solvente:	3 min
Potencial de ionización:	70 eV
Velocidad de escaneo	2500

15.3.1.5  $CH_3OC(O)SSCF_3$

**Tabla 15.31** Condiciones de medida empleados para la especie  $CH_3OC(O)SSCF_3$

Fase móvil:	He
Columna:	1909 J-433 HP-5
Longitud:	30 m
Diámetro interno:	0,25 mm
Relleno:	0,25 $\mu$ m
Volumen de inyección:	1,0 $\mu$ l
Temperatura del horno:	35 °C
Temperatura de inyección:	100 °C
Modo de inyección:	Split
Modo de control de flujo:	presión
Presión:	100 KPa
Flujo total:	31,0 ml/min
Flujo de la columna:	1,33 ml/min
Velocidad lineal:	43 cm/s
Flujo de la purga:	3 ml/min
Relación de Split:	20,0

Programa de temperatura del horno:

Velocidad (°C/min)	Temperatura °C	Tiempo sostenido (min)
-	35	2
4	70	1
50	200	1

Programa de presión:

Velocidad (kPa/min)	Temperatura (kPa)	Tiempo sostenido (min)
-	35	2
4	100	1

Temperatura de la fuente de de iones:	200 °C
Temperatura de la interface:	250 °C
Tiempo de corte del solvente:	3 min
Potencial de ionización:	70 eV
Velocidad de escaneo	2500

### 15.3.2 Espectros de masas (MS)

En esta sección se presentan espectros de masas de algunos de los compuestos estudiados en este trabajo de tesis doctoral.

#### 15.3.2.1 $[Pd(COD)(L2)Cl]$

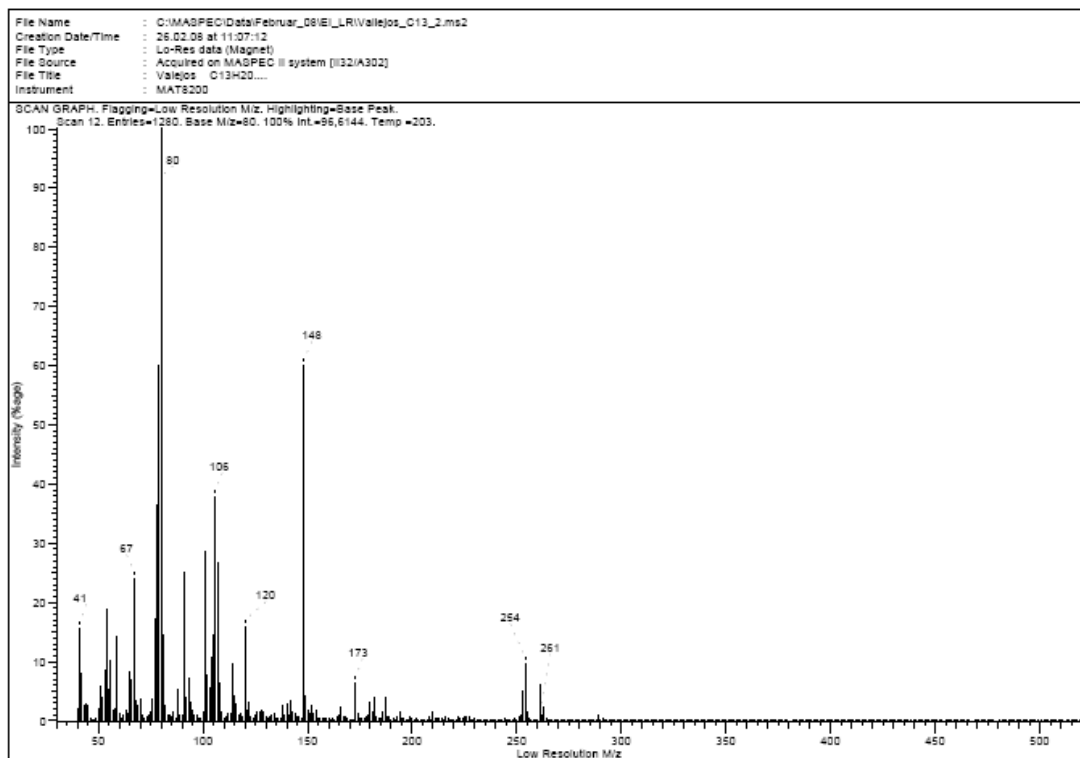


Figura 15.2 Espectro de masas del complejo  $[Pd(COD)(L2)Cl]$

15.3.2.2 [Pd(COD)(L4)Cl]

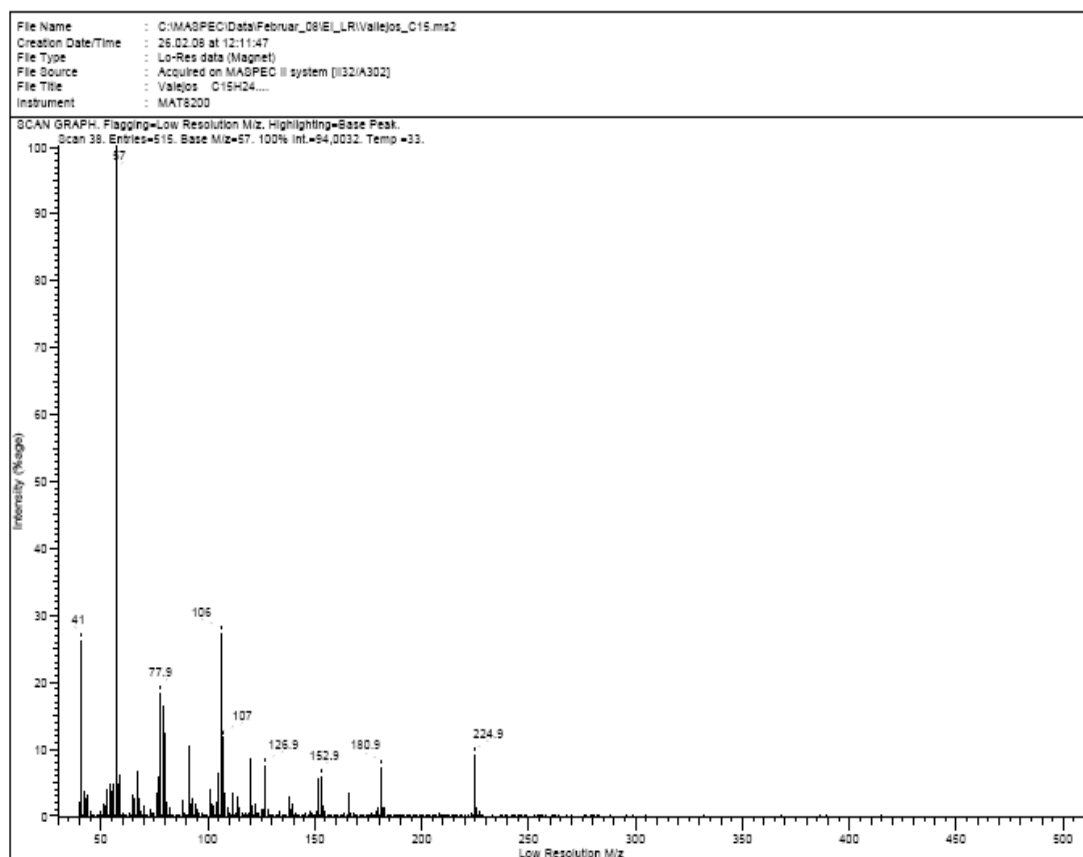
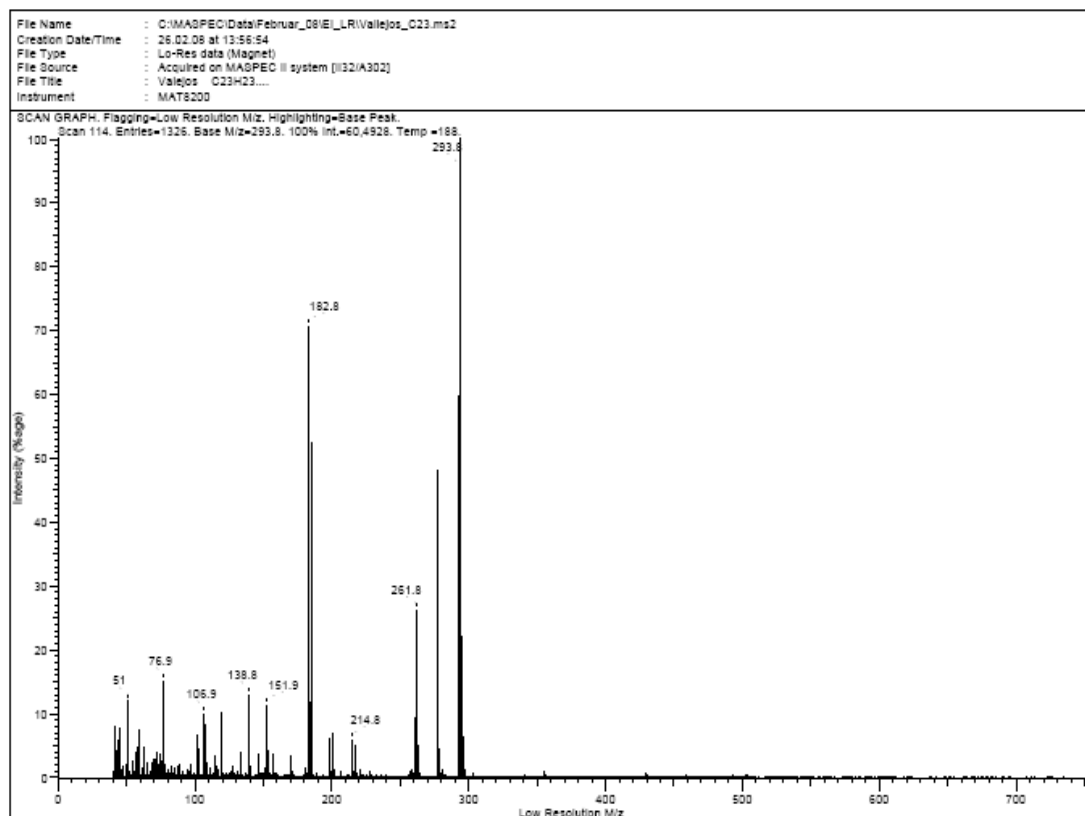
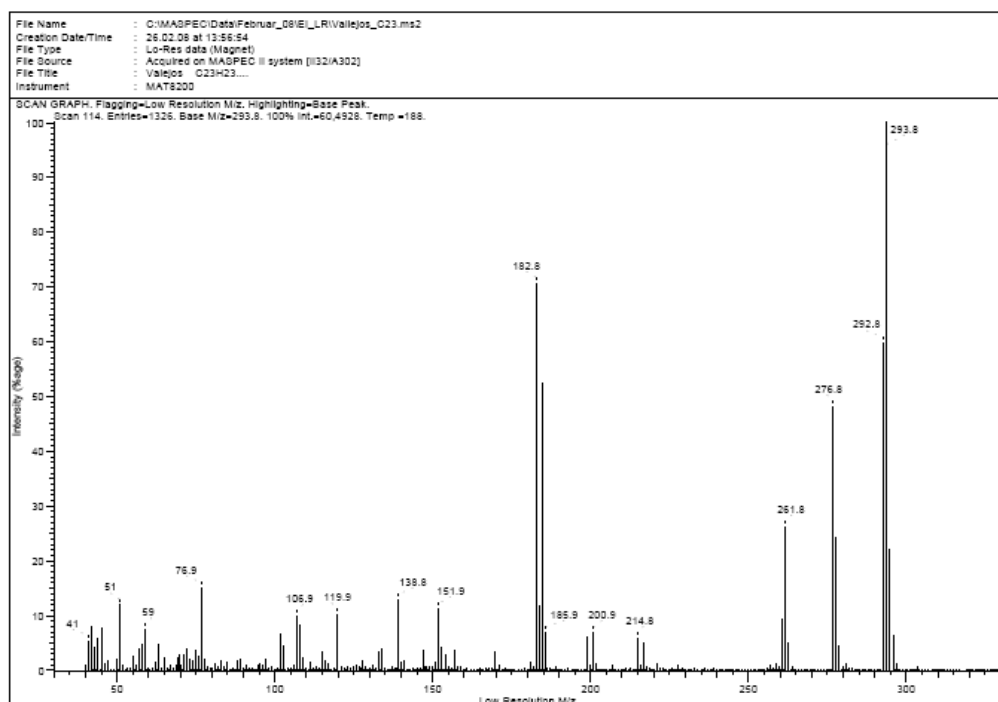


Figura 15.3 Espectro de masas del complejo [Pd(COD)(L4)Cl]

15.3.2.3  $[Au(L2)(PPh_3)]$ Figura 15.4 Espectro de masas del complejo  $[Au(L2)(PPh_3)]$  (región de  $m/z$  entre 40 y 750)Figura 15.5 Espectro de masas del complejo  $[Au(L2)(PPh_3)]$  (región ampliada de  $m/z$  entre 40 y 350)

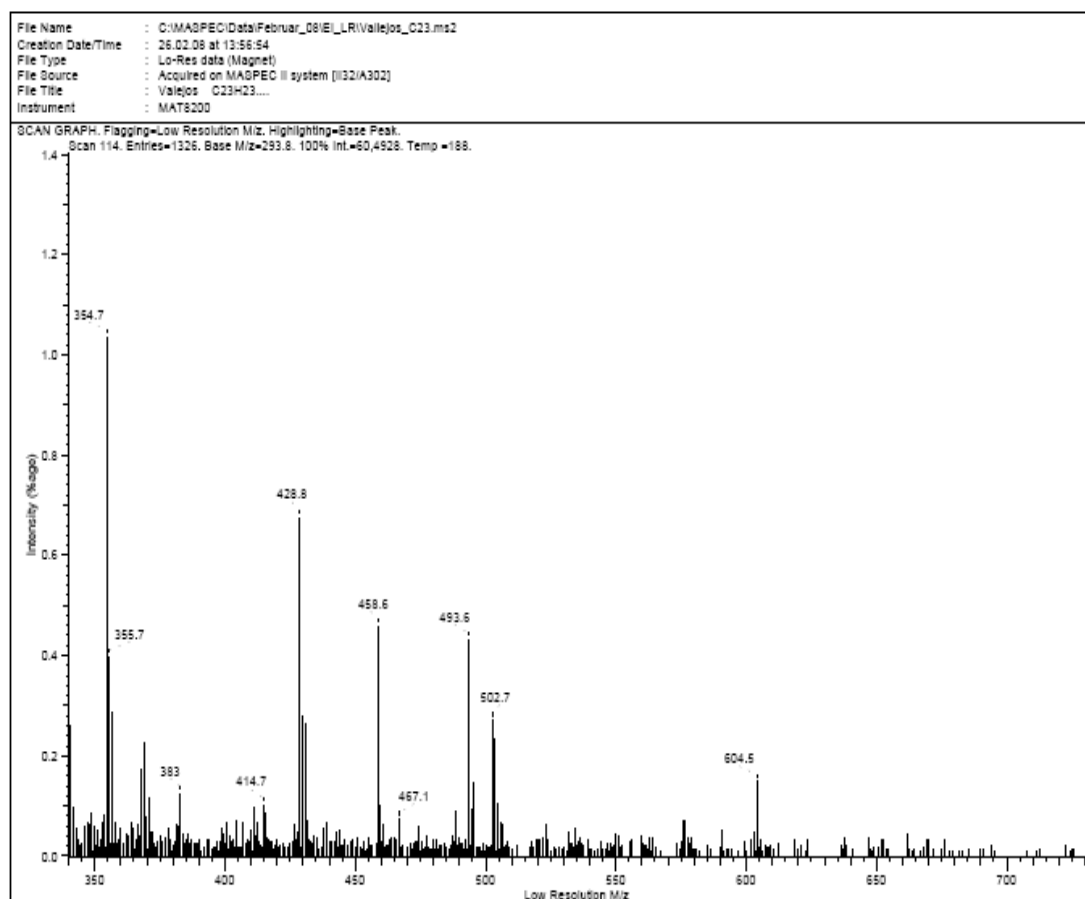


Figura 15.6 Espectro de masas del complejo  $[\text{Au}(\text{L}2)(\text{PPh}_3)]$  (región ampliada de  $m/z$  entre 350 y 750)



#### 15.4 APÉNDICE IV (DETERMINACIÓN DE LA POBLACIÓN TEÓRICA CONFORMACIONAL TEÓRICA RELATIVA A 25°)

En este trabajo de tesis doctoral se realizó este cálculo teórico principalmente para moléculas contenidas en la primera parte y especialmente para aquellos compuestos para los cuales fueron medidos espectros IR en fase gaseosa y no así para aquellas moléculas que a temperatura ambiente son sólidos o líquidos con muy baja presión de vapor.

A modo de ejemplo en este apéndice se muestra el procedimiento usado y las ecuaciones empleadas para el CH<sub>3</sub>OC(O)SNCO.

##### 15.4.1 Determinación de la población teórica relativa de las 3 conformaciones del CH<sub>3</sub>OC(O)SNCO a 25 °C

La determinación del equilibrio conformacional entre dos o más especies se lleva a cabo teniendo en cuenta el análisis termoquímico que se obtiene por medio del cálculo de frecuencias. Las funciones termodinámicas obtenidas por medio del cálculo de frecuencia tales como energía, E°, entalpía, H° y energía libre de Gibbs, G°, están corregidas por la energía de punto cero y la energía térmica del sistema. Para determinar la población relativa porcentual entre dos o más conformaciones se utilizó la ecuación de Boltzman, (ecuación 16.1).

$$P_n = \frac{A_n * e^{\left(\frac{-G_n^0}{RT}\right)}}{\sum_i A_i * e^{\left(\frac{-G_i^0}{RT}\right)}} \quad (15.1)$$

Donde, P<sub>n</sub> es la proporción de cada conformero en el equilibrio a la temperatura T, A<sub>n</sub> es la degeneración de cada estructura, G° se refiere a la energía libre de Gibbs en cal.mol<sup>-1</sup>, R es la constante de los gases ideales (R = 1,9872 cal.mol<sup>-1</sup>. K<sup>-1</sup>) y T se refiere a la temperatura absoluta a la cual se desea calcular el equilibrio en grados Kelvin.

Primeramente se debe determinar si los conformeros a estudiar tienen alguna característica que pueda aumentar la contribución en el equilibrio, es decir que degeneración tienen. Por ejemplo la existencia de enantiómeros los cuales tienen la

misma energía y el mismo espectro vibracional, contribuirá con un  $An = 2$  al grado de degeneración de la molécula.

Así, para el  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SNCO}$  se calculó la concentración relativa a temperatura ambiente para las estructuras más estables, *syn-syn-syn*, *syn-anti-syn* y *syn-syn-anti* ya que las demás conformaciones, según los resultados teóricos, no contribuirían significativamente (ver Tabla 2.1, Capítulo 2).

A continuación se ejemplifica el cálculo de la población teórica en equilibrio en fase gaseosa a  $25^\circ\text{C}$  para el  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SNCO}$  usando el método B3LYP y la base 6/311++G\*\*. Sea **I** una de las conformaciones estables *syn-syn-syn*, **II** la segunda conformación estable *syn-anti-syn* y por último **III** la tercera conformación *syn-syn-anti*.

1. Se aplicó la ecuación 16.1 para conocer la proporción de la conformación **I** en el equilibrio.

$$P_I = \frac{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}}{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)} + A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)} + A_{III} * e^{\left(\frac{-G_{III}^0}{RT}\right)}}$$

2. Se realiza una inversión de la ecuación y se separan los términos:

$$\frac{1}{P_I} = \frac{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}}{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}} + \frac{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)}}{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}} + \frac{A_{III} * e^{\left(\frac{-G_{III}^0}{RT}\right)}}{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}}$$

Se simplifican los términos,

$$\frac{1}{P_I} = 1 + \frac{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0 + G_I^0}{RT}\right)}}{A_I} + \frac{A_{III} * e^{\left(\frac{-G_{III}^0 + G_I^0}{RT}\right)}}{A_I}$$

3. Se reemplazaron los valores numéricos y se despeja  $P_I$ :

$$\frac{1}{P_I} = 1 + \frac{1 * e^{\left(\frac{900,48 \text{ cal.mol}^{-1}}{1,9872 \text{ cal.mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K}}\right)}}{1} + \frac{1 * e^{\left(\frac{840,86 \text{ cal.mol}^{-1}}{1,9872 \text{ cal.mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K}}\right)}}{1}$$

$$\frac{1}{P_I} = 1 + 0,2186 + 0,2417$$

$$P_I = 0,6848$$

4. Se realiza el mismo cálculo para el conformero II:

$$\frac{1}{P_{II}} = \frac{A_I * e^{\left(\frac{-G_I^0}{RT}\right)}}{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)}} + \frac{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)}}{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)}} + \frac{A_{III} * e^{\left(\frac{-G_{III}^0}{RT}\right)}}{A_{II} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0}{RT}\right)}}$$

$$\frac{1}{P_{II}} = \frac{A_I * e^{\left(\frac{-G_{II}^0 + G_I^0}{RT}\right)}}{A_{II}} + 1 + \frac{A_{III} * e^{\left(\frac{-G_{II}^0 + G_{III}^0}{RT}\right)}}{A_{II}}$$

5. Se reemplazaron los valores numéricos y se despejó  $P_{II}$ :

$$\frac{1}{P_{II}} = 4,13 + 1 + 0,904$$

$$P_{II} = 0,1657$$

6. Se realizó el mismo cálculo para el conformero III, las proporciones halladas para estas tres conformaciones son:

$$P_I = 0,6848$$

$$P_{II} = 0,1657$$

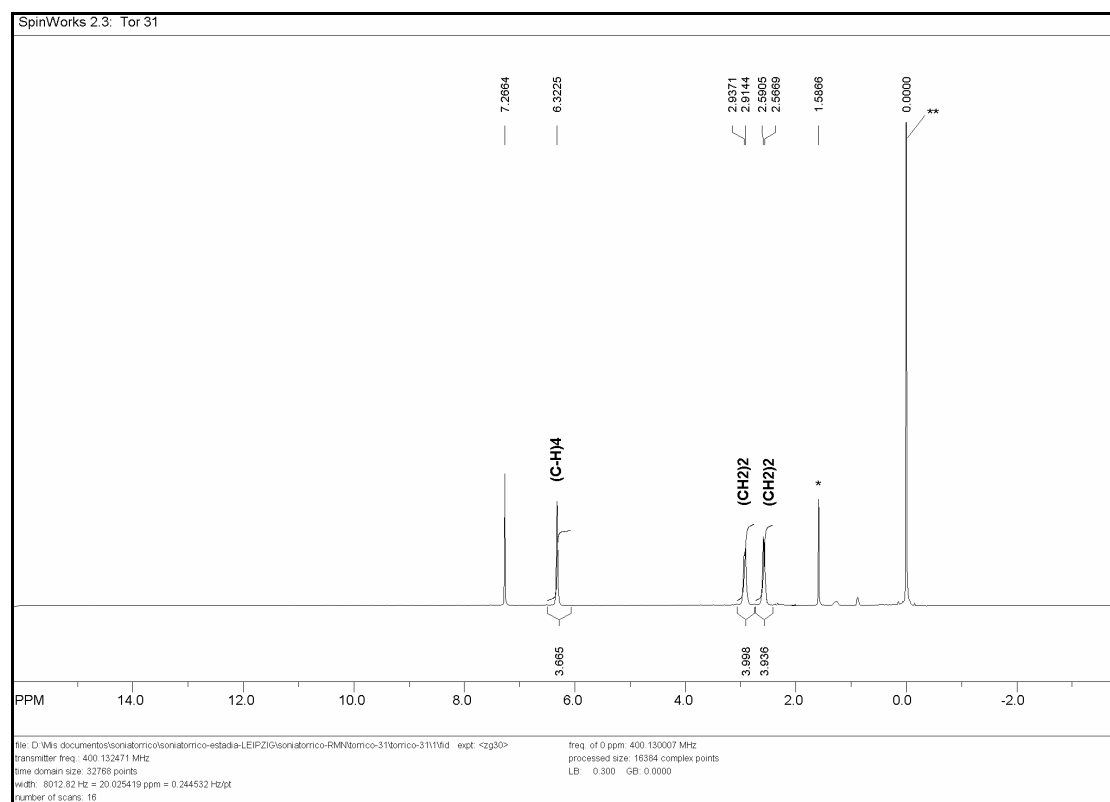
$$P_{III} = 0,1495$$

## 15.5 APÉNDICE V (ESPECTROS DE RMN)

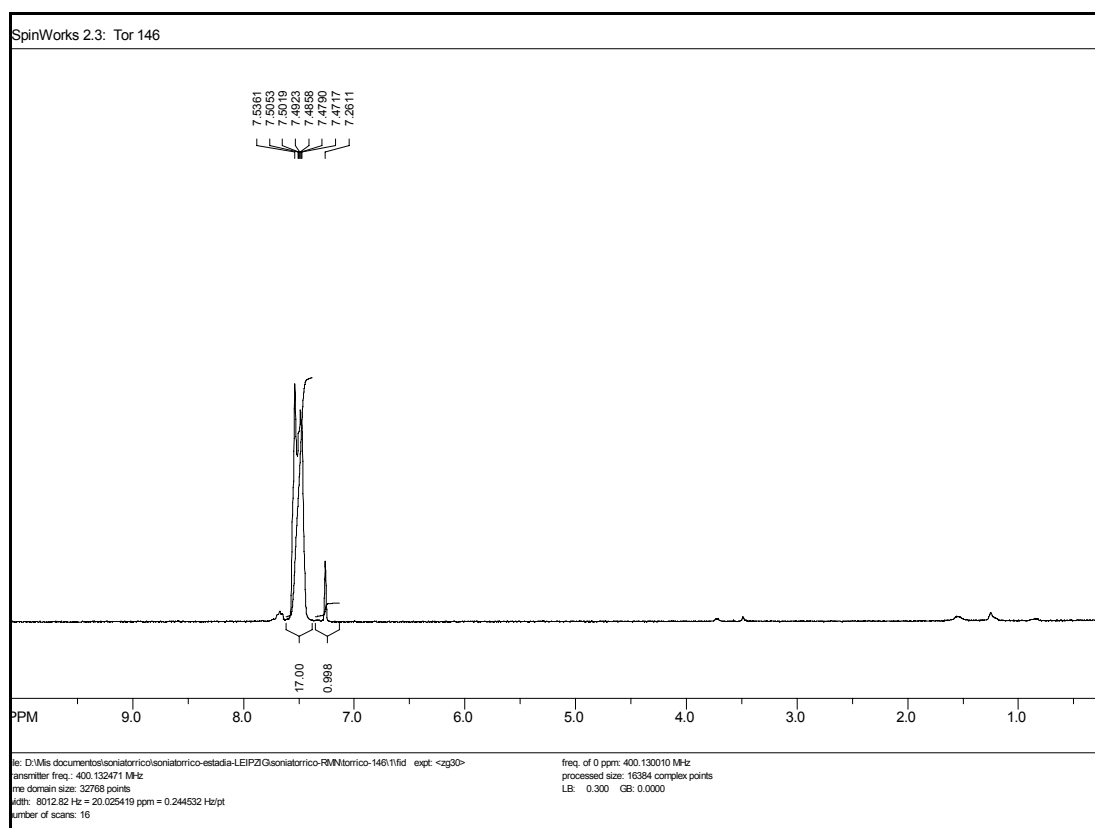
En esta sección de Apéndices se presenta información complementaria de espectros  $^1\text{H}$  y  $^{31}\text{P}$  RMN de algunos de los compuestos estudiados en este trabajo de tesis doctoral.

### 15.5.1 Espectros $^1\text{H}$ RMN

#### 15.5.1.1 $\text{Pd}(\text{COD})\text{Cl}_2$



**Figura 15.7** Espectro de  $^1\text{H}$  RMN del  $\text{Pd}(\text{COD})\text{Cl}_2$ , la señal marcada con \* corresponde a los protones del agua y \*\* corresponde a impurezas introducidas durante la manipulación de la muestra (comúnmente glicerina)

15.5.1.2 AuCIPPh<sub>3</sub>Figura 15.8 Espectro de <sup>1</sup>H RMN del AuCIPPh<sub>3</sub>

## 15.5.2 Espectros de $^{31}\text{P}$ RMN

### 15.5.2.1 $\text{AuCIPPh}_3$

SpinWorks 2.3: Tor 146

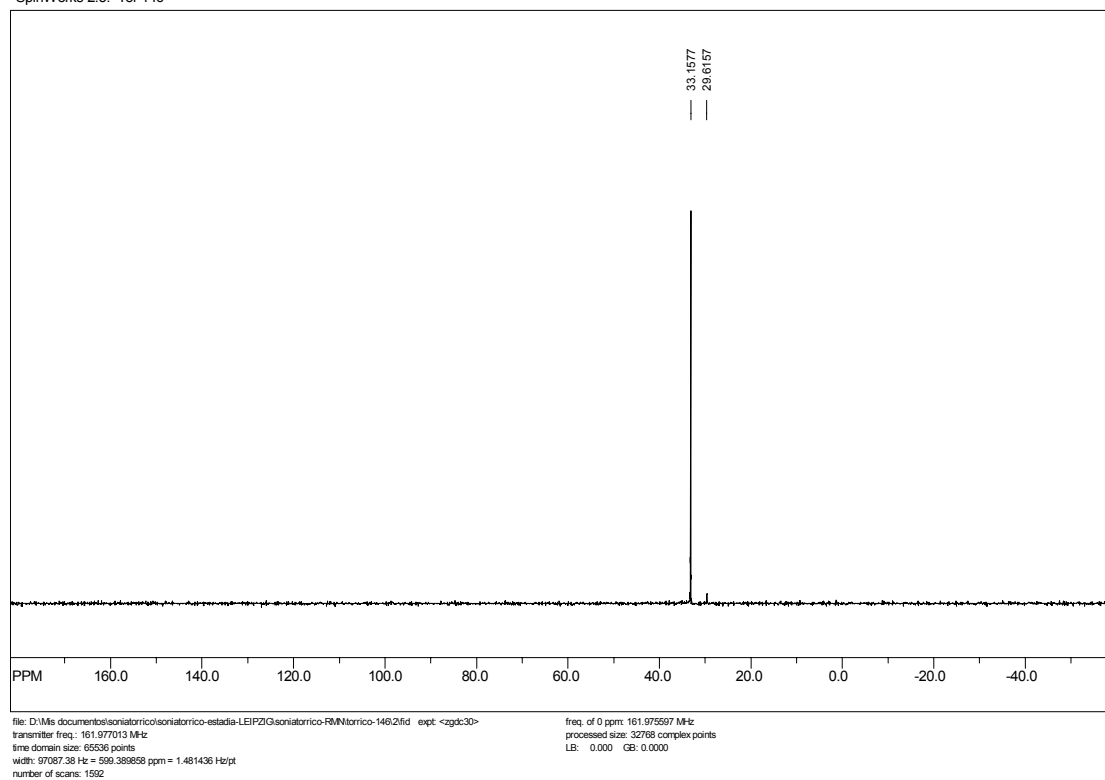
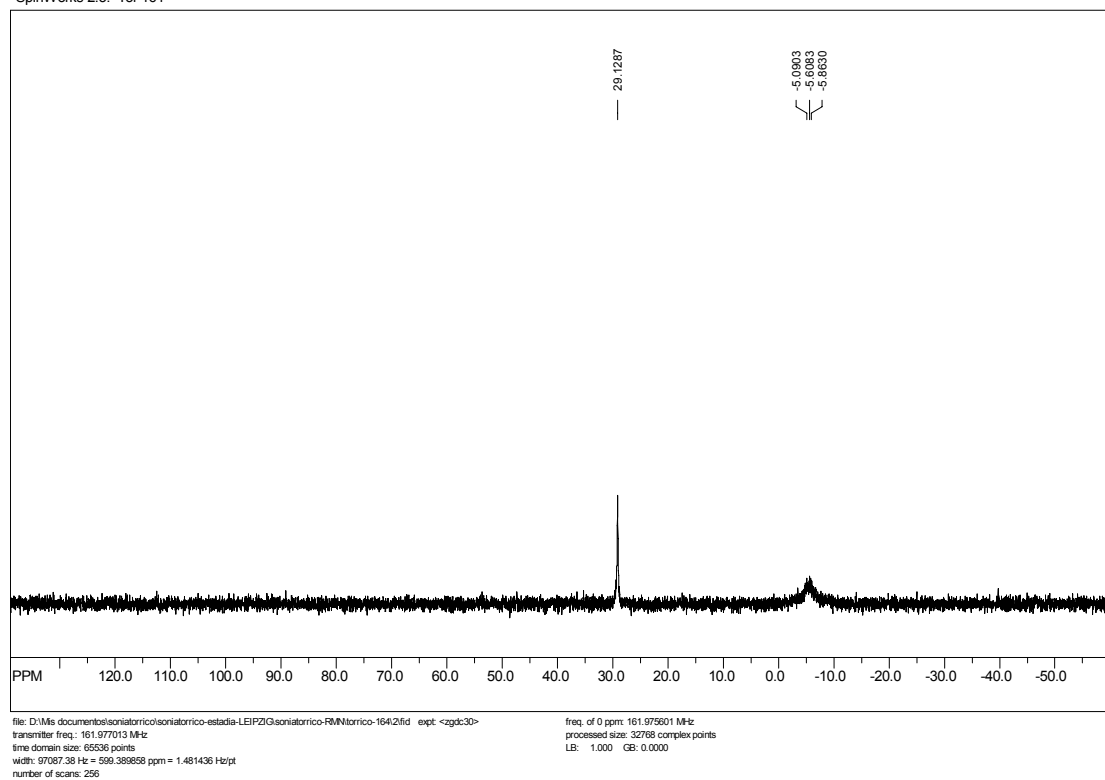


Figura 15.9 Espectro de  $^{31}\text{P}$  RMN del aducto de partida  $\text{AuCIPPh}_3$

15.5.2.2  $[\text{NiCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$ 

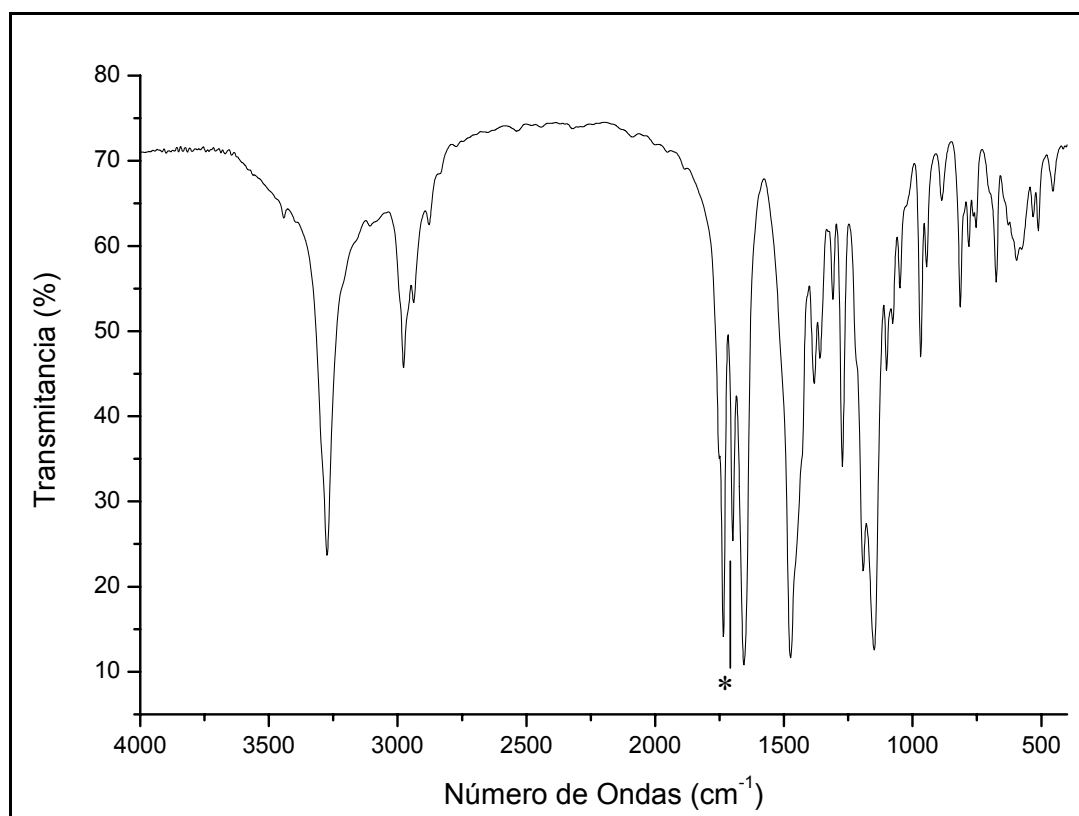
SpinWorks 2.3: Tor 164

Figura 15.10 Espectro de  $^{31}\text{P}$  RMN del aducto de partida  $[\text{NiCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$

## 15.6 APÉNDICE VI (ESPECTROS FTIR)

En esta sección de Apéndices se presenta información complementaria de espectros FTIR de algunos de los compuestos estudiados en este trabajo de tesis doctoral.

### 15.6.1 Espectro FTIR del $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$



**Figura 15.11** Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$  medido en fase sólida con KBr. La banda marcada con \* corresponde al  $\text{C}=\text{O}$  del solvente  $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OC}_2\text{H}_5$



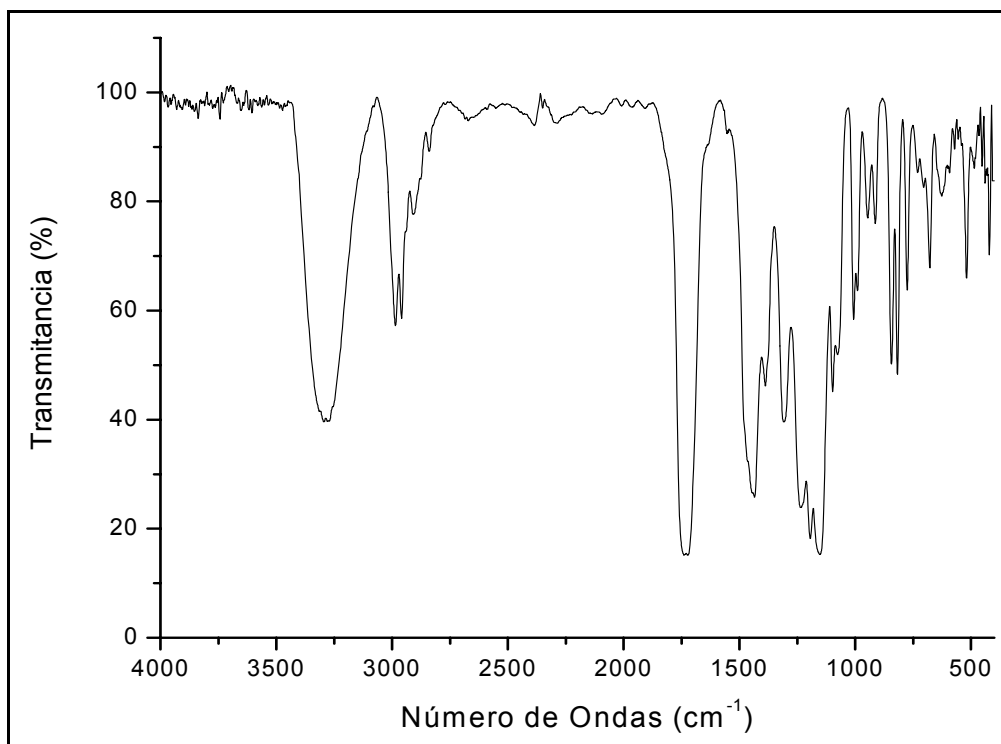
**15.6.2 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}_2\text{H}_5$** 

Figura 15.12 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}_2\text{H}_5$  medido en fase líquida

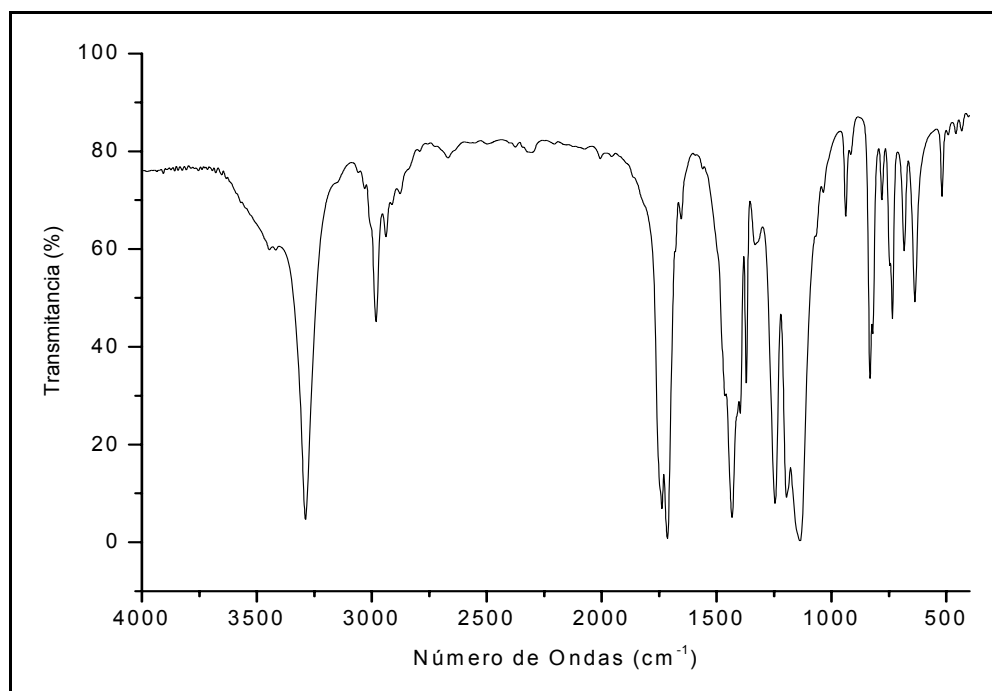
**15.6.3 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$** 

Figura 15.13 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$  medido en fase sólida

**15.6.4 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{SC}_2\text{H}_5$**

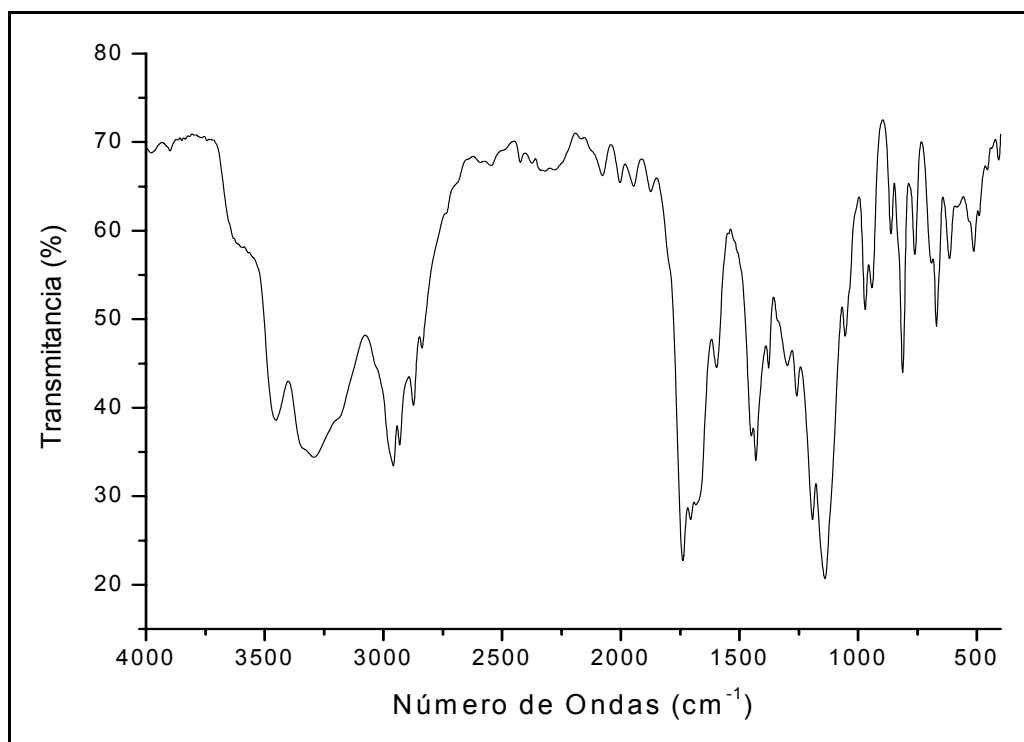


Figura 15.14 Espectro FTIR del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{SC}_2\text{H}_5$  medido en fase líquida

**15.6.5 Espectro FTIR del  $\text{Pd}(\text{COD})\text{Cl}_2$**

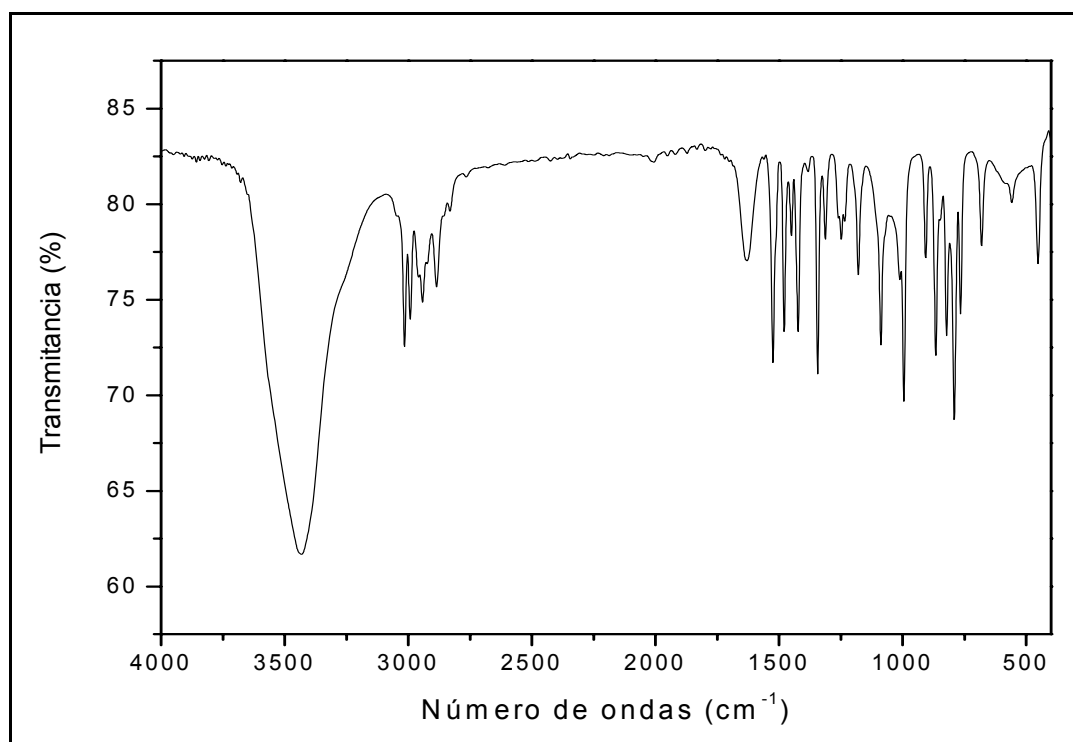
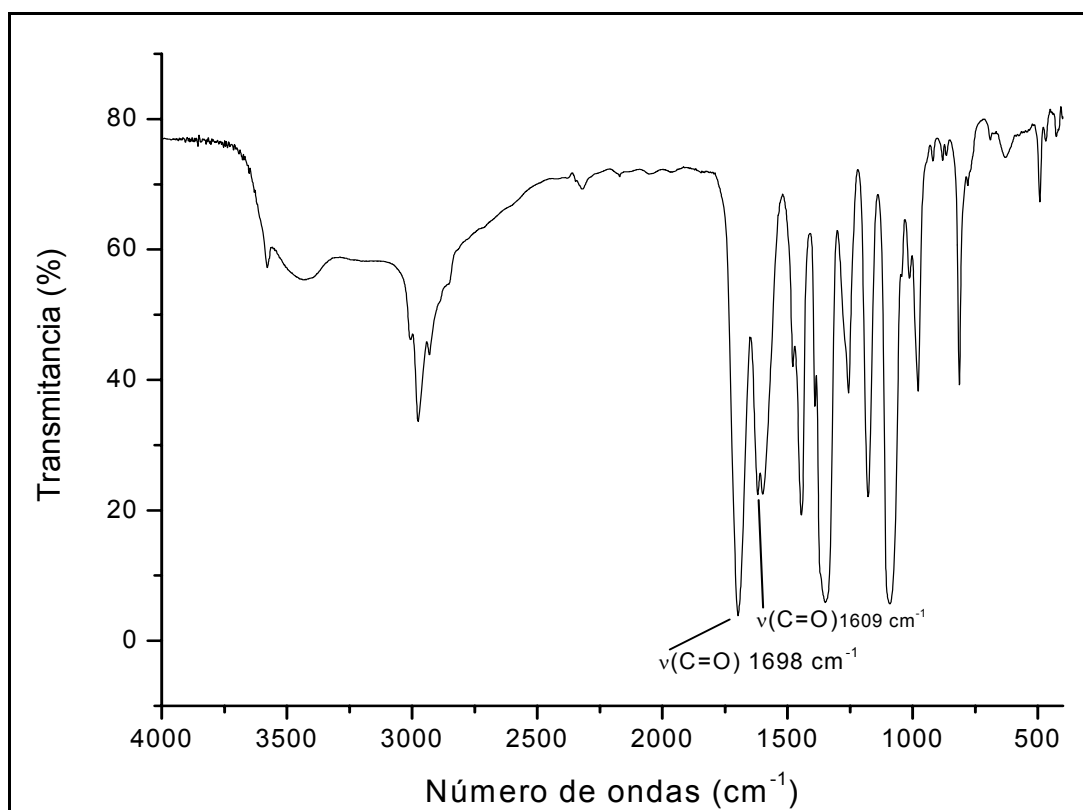


Figura 15.15 Espectro FTIR del  $\text{Pd}(\text{COD})\text{Cl}_2$  medido en fase sólida

**15.6.6 Espectro FTIR de la sal  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{Na})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$** **Figura 15.16** Espectro FTIR de la sal  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{Na})\text{C}(\text{O})\text{OC}(\text{CH}_3)_3$

15.6.7 Espectro FTIR del complejo [Pd(COD)(L2)Cl]

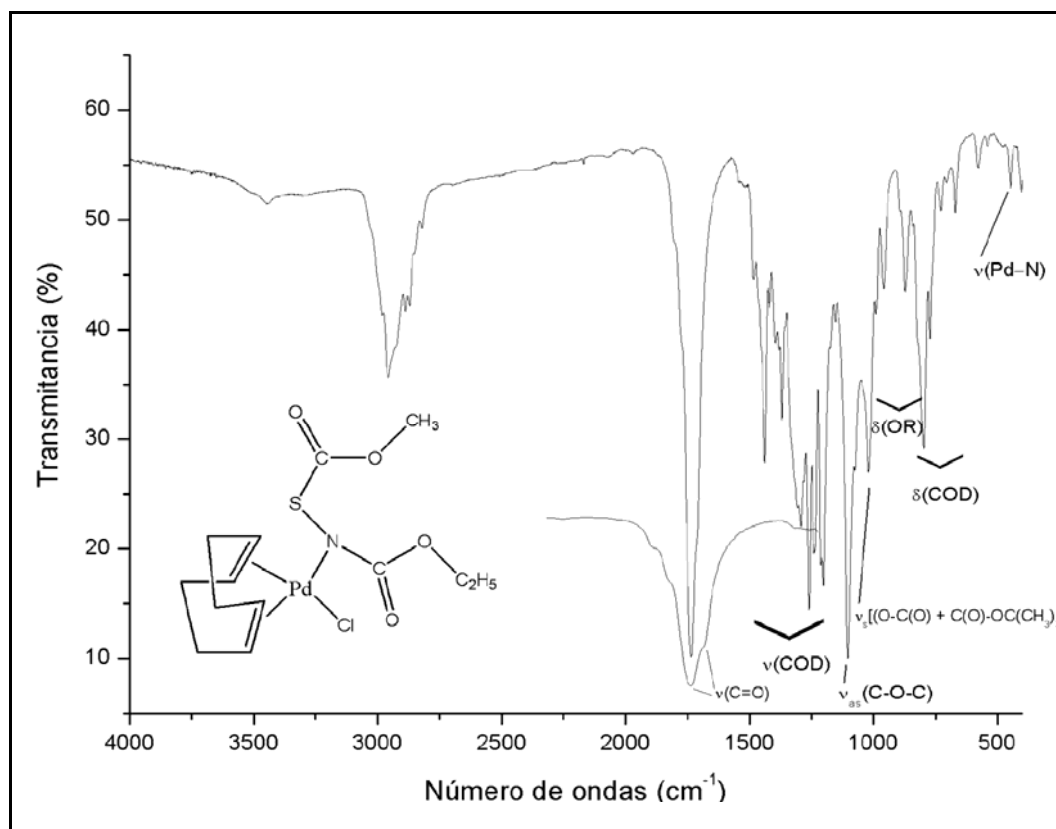


Figura 15.17 Espectro FTIR del complejo de Pd(II) [Pd(COD)(L2)Cl]

## 15.7 APÉNDICE VII (ASIGNACIÓN DE MODOS NORMALES DE VIBRACIÓN)

En esta sección se presenta la asignación de los modos normales de vibración de la  $[\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})]_2\text{CO}$  y de los tiocarbamatos de O-metilo y O-etilo, respectivamente.

### 15.7.1 $[\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})]_2\text{CO}$

**Tabla 15.32** Números de onda experimentales y teóricos y asignación de los modos de vibración del  $[\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{SN}(\text{H})]_2\text{CO}$

Modo	Experimental		Calculado <sup>e</sup>		Asignación/ (Descripción Aproximada) <sup>a,b</sup>
	IR <sup>c</sup>	Raman <sup>d</sup>	<i>anti-anti</i> <sup>f</sup>	<i>syn-anti</i> <sup>g</sup>	
	3448				2 x $\nu_{10}$
$\nu_1$	3248 vs	3246	3593 (0.05)	3601 (0.05)	$\nu_s(\text{N-H})$ /A
$\nu_2$			3586 (0.01)	3581 (0.04)	$\nu_{as}(\text{N-H})$ /B
	3126 vvw				Impurity
$\nu_3$		3044	3168 (0.00)	3171 (0.00)	$\nu_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_4$	3014 vvw	3016	3168 (0.01)	3168 (0.00)	$\nu_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_5$			3135 (0.02)	3138 (0.01)	$\nu_{as}(\text{CH}_2)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_6$			3135 (0.00)	3134 (0.01)	$\nu_{as}(\text{CH}_2)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_7$			3057 (0.00)	3058 (0.02)	$\nu_s(\text{CH}_3)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_8$	2957 vw	2958	3057 (0.05)	3057 (0.02)	$\nu_s(\text{CH}_3)^{a,b}$ (2)/B
	2868	2841			$\nu_{11} + \nu_{21}$
$\nu_9$			1818 (0.06)	1812 (0.22)	$\nu(\text{C=O})^{a,b,c}$ (1)/A
$\nu_{10}$	1732 vs	1730	1800 (0.39)	1804 (0.16)	$\nu_{as}(\text{C=O})^{a,b}$ /B
$\nu_{11}$	1650 vs	1650	1791 (0.15)	1785 (0.22)	$\nu_s(\text{C=O})^{a,b} + \nu_{as}(\text{C=O})^c$ /A
	1630				2 x $\nu_{31}$
$\nu_{12}$			1496 (0.00)	1496 (0.01)	$\rho_s(\text{CH}_2)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{13}$			1496 (0.01)	1496 (0.01)	$\rho_s(\text{CH}_2)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{14}$	1497 s	1496	1485 (0.01)	1484 (0.01)	$\rho_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{15}$			1485 (0.00)	1484 (0.01)	$\rho_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{16}$	1456 w	1455	1467 (0.02)	1467 (0.01)	$\rho_s(\text{CH}_3)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{17}$			1467 (0.00)	1467 (0.01)	$\rho_s(\text{CH}_3)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{18}$	1431 m	1433	1448 (0.27)	1461 (0.22)	$\rho_s(\text{N-H})$ /A
$\nu_{19}$			1421 (0.02)	1393 (0.02)	$\rho_{as}(\text{N-H})$ /B
	1331				2 x $\nu_{36}$
	1262				$\nu_{36} + \nu_{39}$
$\nu_{20}$			1212 (0.04)	1223 (0.06)	$\rho_s(\text{CH}_3\text{O})^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{21}$	1206 vs	1195	1211 (0.18)	1210 (0.03)	$\rho_{as}(\text{CH}_3\text{O})^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{22}$	1167 vs	1158	1181 (0.35)	1208 (0.16)	$\nu_{as}(\text{COC})^{a,b}$ (2) + $\rho_s(\text{N-H})$ /B
$\nu_{23}$			1178 (0.10)	1173 (0.09)	$\nu_{as}(\text{COC})^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{24}$			1168 (0.00)	1168 (0.00)	$\delta_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{25}$			1168 (0.00)	1168 (0.00)	$\delta_{as}(\text{CH}_3)^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{26}$			1134 (1.00)	1161 (1.00)	$\nu_{as}(\text{N-C-N}) + \rho_s(\text{N-H})$ /B
$\nu_{27}$	1094 vvw	1065	1037 (0.01)	1028 (0.02)	$\nu_s(\text{N-C-N})$ /A
	1020				2 x $\nu_{39}$
$\nu_{28}$	939 w	940	964 (0.01)	964 (0.00)	$\nu(\text{CH}_3\text{O})^{a,b}$ (1)/A
$\nu_{29}$			964 (0.01)	957 (0.00)	$\nu(\text{CH}_3\text{O})^{a,b}$ (2)/B
$\nu_{30}$			929 (0.00)	912 (0.01)	$\delta_s(\text{N-C-N})$ /A

v <sub>31</sub>	815 m	821	824 (0.04)	842 (0.00)	$\delta(\text{O}-\text{C}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>32</sub>			824 (0.00)	824 (0.02)	$\delta(\text{O}-\text{C}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>33</sub>			813 (0.03)	820 (0.02)	$\nu(\text{S}-\text{N})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>34</sub>			761 (0.01)	756 (0.01)	$\delta_{\text{oop}}(\text{NC}(\text{O})\text{N})/\text{B}$
v <sub>35</sub>			729 (0.01)	681 (0.00)	$\delta(\text{N}-\text{C}=\text{O})^{\text{a,b}}$ /B
v <sub>36</sub>	677 w		675 (0.01)	673 (0.01)	$\delta_{\text{oop}}(\text{OC}(\text{O})\text{S})^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>37</sub>	668 sh		672 (0.01)	588 (0.00)	$\delta_{\text{oop}}(\text{OC}(\text{O})\text{S})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>38</sub>			515 (0.00)	523 (0.00)	$\delta(\text{O}=\text{C}-\text{S})^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>39</sub>	509 w	518	505 (0.01)	507 (0.02)	$\delta(\text{O}=\text{C}-\text{S})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>40</sub>	438 vvw	440	453 (0.08)	487 (0.01)	$\delta_{\text{oop}}(\text{N}-\text{H})^{\text{s}}$ /B
v <sub>41</sub>		391	423 (0.00)	471 (0.01)	$\rho_{\text{s}}(\text{S}-\text{N}-\text{C})^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>42</sub>		341	378 (0.04)	462 (0.08)	$\delta_{\text{oop}}(\text{N}-\text{H})^{\text{as}}$ /A
v <sub>43</sub>			372 (0.01)	375 (0.00)	$\delta(\text{O}-\text{C}-\text{S})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>44</sub>			324 (0.02)	346 (0.02)	$\tau(\text{COC}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (1) + $\rho_{\text{as}}(\text{N}-\text{H})/\text{A}$
v <sub>45</sub>		289	305 (0.07)	314 (0.02)	$\tau(\text{COC}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (2) + $\tau(\text{S}-\text{N}-\text{C}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>46</sub>			266 (0.00)	287 (0.02)	$\tau(\text{CS}-\text{NC})^{\text{a,b}}$ (2) /B
v <sub>47</sub>		215	260(0.00)	250 (0.00)	$\delta_{\text{as}}(\text{N}-\text{H})/\text{A}$
v <sub>48</sub>			207 (0.00)	210 (0.00)	aleteo de la rama izquierda de la molécula
v <sub>49</sub>			189 (0.00)	194 (0.00)	aleteo de la rama derecha de la molécula
v <sub>50</sub>			188 (0.00)	179 (0.00)	$\rho_{\text{s}}(\text{N}-\text{H}) + \rho_{\text{s}}(\text{CH}_3)$ (2)/B
v <sub>51</sub>			149 (0.00)	146 (0.00)	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3\text{O})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>52</sub>			140 (0.00)	137 (0.00)	$\delta_{\text{as}}(\text{CH}_3\text{O})^{\text{a,b}}$ (1)/B
v <sub>53</sub>			119 (0.00)	116 (0.00)	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>54</sub>			115 (0.00)	114 (0.00)	$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>55</sub>			88 (0.00)	79 (0.00)	torsión de toda la molécula/B
v <sub>56</sub>			70 (0.00)	69 (0.00)	$\tau(\text{COC}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>57</sub>			64 (0.00)	61 (0.00)	$\tau(\text{COC}=\text{O})^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>58</sub>			48 (0.00)	48 (0.00)	$\rho(-\text{SC}(\text{O})\text{OC}-)^{\text{a,b}}$ (1)/A
v <sub>59</sub>			27 (0.00)	28 (0.00)	$\rho(-\text{SC}(\text{O})\text{OC}-)^{\text{a,b}}$ (2)/B
v <sub>60</sub>			21 (0.00)	21 (0.00)	$\tau(\text{SC}-\text{OC})^{\text{a,b}}$ (1)/A

<sup>a</sup> Lado izquierdo de la molécula respecto al grupo carbonilo central C2=O3; <sup>b</sup> Lado derecho de la molécula respecto al grupo carbonilo central C2=O3; <sup>c</sup> Intensidad de las bandas: vs = muy intenso, s = intenso, m = media, sh = hombro, w = débil, vw = muy débil, vvw = muy muy débil; <sup>d</sup> sólido a temperatura ambiente. <sup>e</sup> En paréntesis la intensidad de la banda. <sup>f</sup> Conformación observada experimentalmente por difracción de rayos X. <sup>g</sup> Conformación más estable en fase gaseosa encontrada por métodos teóricos. (1) Movimiento simétrico **a** respecto a **b**. (2) Movimiento antisimétrico de **a** respecto de **b**.

15.7.2 CH<sub>3</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

Tabla 15.33 Números de onda experimentales y teóricos y asignación de los modos de vibración del CH<sub>3</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

Modo	Experimental		Calculado <sup>e</sup>	Asignación/ (Descripción aproximada) <sup>a,b</sup> (1,2) /Simetría
	IR <sup>c</sup>	Raman <sup>d</sup>	B3LYP/6-311++G** s-s-a	
	3511			2 x v <sub>8</sub>
	3293			v <sub>8</sub> + v <sub>13</sub>
v <sub>1</sub>	3216 m	3192 (5)	3622 (10)	v(N-H) /A'
v <sub>2</sub>	3026 w	3029 (25)	3163 (2)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> /A'
v <sub>3</sub>	3007 w	3009 (10)	3162 (2)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>a</sup> /A'
v <sub>4</sub>	2965 w	2997 (10)	3133 (2)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>b</sup> /A''
v <sub>5</sub>	2950 w	2965 (57)	3129 (2)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>a</sup> /A''
v <sub>6</sub>	2887 vvw	2948 (65)	3055 (2)	v <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,b</sup> /A'
v <sub>7</sub>	2855 vvw	2851 (12)	3054 (6)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,b</sup> /A'
v <sub>8</sub>	1768 vs	1761 (95)	1828 (56)	v(C=O) /A'
v <sub>9</sub>	1548 vs	1493 (38)	1541 (100)	δ(N-H) /A'
v <sub>10</sub>		1441 (35)	1500 (2)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>a</sup> /A''
v <sub>11</sub>		1423 (10)	1492 (2)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> /A''
v <sub>12</sub>			1484 (1)	δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>13</sub>	1451 s		1481 (26)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,b</sup> (2)/A'
v <sub>14</sub>	1423 vw		1479 (2)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> /A''
v <sub>15</sub>	1345 m	1345 (22)	1469 (6)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,b</sup> (2)/A'
v <sub>16</sub>	1280 w		1347 (44)	v <sub>as</sub> (N-C(S)-O) + ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> /A'
v <sub>17</sub>	1255 vs	1245 (40)	1266 (43)	v(C=S) + v <sub>s</sub> (N-C(S)-O) /A'
v <sub>18</sub>			1212 (1)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>19</sub>	1205 vvs	1205 (32)	1201 (45)	v <sub>as</sub> (O-C(O)-N) + ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> /A'
v <sub>20</sub>			1175 (<1)	δ(CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A''
v <sub>21</sub>			1169 (<1)	δ(CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> /A''
v <sub>22</sub>	1152 m	1146 (35)	1162 (48)	δ(CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> /A'
	1101			2 x v <sub>30</sub>
v <sub>23</sub>	1070 vs	1068 (45)	1099 (47)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> -O <sup>a</sup> + O-CH <sub>3</sub> <sup>b</sup> ) /A'
v <sub>24</sub>	1032 w	1031 (9)	1048 (3)	v <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> -O <sup>a</sup> + O-CH <sub>3</sub> <sup>b</sup> ) + v <sub>s</sub> (C-N-C) /A'
v <sub>25</sub>	928 vvw	930 (100)	945 (3)	v <sub>s</sub> (C-O-C) <sup>a</sup> /A'
v <sub>26</sub>	790 w	781 (93)	795 (<1)	v <sub>s</sub> (C-O-C) <sup>b</sup> /A'
v <sub>27</sub>	765 w		772 (3)	δoop(O-C(O)S) /A''
v <sub>28</sub>	725 m	728 (30)	731 (2)	δ(O-C=O) <sup>a</sup> + δ(O=C-N) /A'
v <sub>29</sub>	639 w	638 (30)	646 (10)	ρ(N-H) /A''
v <sub>30</sub>	590 w	583 (70)	635 (1)	δoop(N-C(S)O) /A'
v <sub>31</sub>			596 (<1)	τ(C-O-C-H) <sup>b</sup> /A'
v <sub>32</sub>	410 vw	404 (45)	389 (1)	τ(O=C-N-H) <sup>a</sup> + τ(N-C-O-C) <sup>b</sup> (1)/A'
v <sub>33</sub>		347 (76)	337 (1)	τ(O=C-N-H) <sup>a</sup> + τ(N-C-O-C) <sup>b</sup> (2)/A'
v <sub>34</sub>		317 (10)	300 (4)	torsion de toda la molécula /A'
v <sub>35</sub>		268 (28)	246 (<1)	aletéo de toda la molécula /A'
v <sub>36</sub>		217 (7)	201 (1)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> + δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> (2) /A''
v <sub>37</sub>		163 (30)	167 (<1)	δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> + δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> (1) /A''
v <sub>38</sub>			147 (<1)	δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> + δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>b</sup> (2) /A''
v <sub>39</sub>			131 (<1)	τ <sub>s</sub> (O-CH <sub>3</sub> <sup>a</sup> + O-CH <sub>3</sub> <sup>b</sup> ) /A'
v <sub>40</sub>			118 (<1)	τ(CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A''
v <sub>41</sub>			65 (<1)	τ(CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A''
v <sub>42</sub>			44 (<1)	δoop(N-C-O) <sup>b</sup> + τ <sub>s</sub> (O-CH <sub>3</sub> <sup>b</sup> ) /A''

<sup>a</sup> grupo metilo de la molécula vecino al C=O. <sup>b</sup> metilo vecino al grupo C=S. <sup>c</sup> intensidad de las bandas: vs =muy intenso, s =intenso, m = mediano, sh = hombror, w =débil, vw = muy débil, vvw =muy muy débil; <sup>d</sup> sólido a temperatura ambiente, in paréntesis la intensidad Raman relativa (1,7 u. a. = 100 %); <sup>e</sup> en paréntesis la intensidad relativa de las bandas para la forma más estable (100% = 679.10 Km/mol). (1) movimiento del grupo del lado **a** simétrico respecto al lado **b** (2) movimiento del lado **a** antisimétrico respecto al lado **b**.

### 15.7.3 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

**Tabla 15.34** Números de onda experimentales y teóricos y asignación de los modos de vibración del CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OC(S)N(H)C(O)OCH<sub>3</sub>

Experimental			Calculado <sup>f</sup>	Asignación/ (Descripción aproximada) <sup>a,b</sup> (1,2)
Modo	IR <sup>d</sup>	Raman <sup>e</sup>	B3LYP/6-311++G**	/Simetría
			s-a-s-a	
	3513			2 x v <sub>10</sub>
	3292			v <sub>10</sub> + v <sub>11</sub>
v <sub>1</sub>	3204 s	3188 (20)	3621 (9)	v(N-H) /A'
v <sub>2</sub>	3053 vvw	3055 (25)	3161 (2)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>3</sub>	3016 vw	3015 (25)	3127 (2)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>a</sup> /A'
v <sub>4</sub>	2995 w	2990 (50)	3124 (4)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>b,c</sup> (1)/A'
v <sub>5</sub>	2966 w	2968 (98)	3108 (3)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> /A'
v <sub>6</sub>	2945 vvw	2937 (60)	3098 (<1)	v <sub>as</sub> (C-H) <sup>b,c</sup> (2)/A''
v <sub>7</sub>	2905 vvw	2904 (40)	3058 (1)	v <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> /A'
v <sub>8</sub>	2873 vvw	2873 (20)	3053 (5)	v <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>9</sub>	2842 vvw	2841 (20)	3041 (2)	v <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> /A'
v <sub>10</sub>	1770 vs	1768 (100)	1826 (53)	v(C=O) + ρ(N-H) /A'
v <sub>11</sub>	1537 vs		1537 (100)	δ(N-H) /A'
v <sub>12</sub>			1517 (6)	ρ(CH <sub>2</sub> ) <sup>b,c</sup> (2)/A'
v <sub>13</sub>	1490 vvw	1493 (5)	1499 (6)	ρ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>14</sub>	1475 w	1465 (50)	1497 (1)	ρ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> + ρ(CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> (1)/A''
v <sub>15</sub>	1458 w	1453 (30)	1483 (2)	ρ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,c</sup> (2)/A''
v <sub>16</sub>	1445 vvw		1483 (<1)	ρ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a,c</sup> (1)/A''
v <sub>17</sub>	1431 w	1431 (5)	1470 (<1)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>18</sub>	1402 m	1399 (7)	1431 (7)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> + ρ <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> (2)/A''
v <sub>19</sub>	1374 m	1373 (3)	1409 (13)	ρ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> + ρ <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> (1)/A''
v <sub>20</sub>	1315 m	1310 (25)	1331 (47)	v <sub>as</sub> (N-C(S)-O) + ρ <sub>s</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> /A'
v <sub>21</sub>	1292 vvw		1292 (<1)	ρ(CH <sub>2</sub> )/A''
v <sub>22</sub>	1266 s	1265 (15)	1264 (46)	v(C=S) + v <sub>s</sub> (N-C-O) <sup>b</sup> /A'
v <sub>23</sub>	1207 vs	1199 (20)	1211 (1)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A'
v <sub>24</sub>	1190 vs	1183 (12)	1182 (98)	v <sub>as</sub> (N-C(S)-O) /A'
v <sub>25</sub>			1175 (<1)	δ <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>a</sup> /A''
v <sub>26</sub>	1157 w(sh)	1156 (5)	1174 (1)	δ(CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> + δ(CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> (2)/A''
v <sub>27</sub>	1106 m	1108 (30)	1128 (6)	δ <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> /A'
v <sub>28</sub>	1054 vs	1051 (60)	1078 (38)	v <sub>as</sub> (CH <sub>3</sub> -O + O-CH <sub>2</sub> ) /A'
v <sub>29</sub>	1028 m(sh)		1049 (5)	v <sub>s</sub> (CH <sub>3</sub> -O + O-C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) /A'
v <sub>30</sub>	975 vvw	973 (45)	981 (<1)	δ(C-N-C) + δ(C-C-H) <sup>b</sup> /A'
v <sub>31</sub>	916 w	917 (48)	930 (3)	v <sub>s</sub> (C-O-C) <sup>a</sup> /A'
v <sub>32</sub>	822 vvw	817 (2)	814 (<1)	δ(CH <sub>2</sub> ) <sup>b</sup> + δ(CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> (1)/A''
v <sub>33</sub>	775 w(sh)		778 (<1)	δ(C-O-C) <sup>b</sup> + δ(CH <sub>3</sub> ) <sup>c</sup> /A'
v <sub>34</sub>	766 w	769 (95)	772 (3)	δ <sub>oop</sub> (O-C(O)S) /A''
v <sub>35</sub>	741 w		731(1)	δ(O-C=O) <sup>a</sup> + δ(O=C-N) /A'
v <sub>36</sub>	724 w	728 (30)	653 (9)	ρN-H /A''
v <sub>37</sub>	646	643 (12)	633 (1)	δ <sub>oop</sub> (N-C(S)O) /A'
v <sub>38</sub>	606 w	598 (35)	613 (<1)	τ((S)C-O-C) <sup>b</sup> + δ(O-C-C) <sup>b,c</sup> /A'



V <sub>39</sub>		404 (25)	395 (<1)	$\tau(\text{C-O-C})^{\text{b,c}} + \delta(\text{O=C-N})/\text{A}'$
V <sub>40</sub>		382 (65)	368 (<1)	$\delta(\text{C-O-C})^{\text{a}} + \delta(\text{O-C-C})^{\text{b}}/\text{A}'$
V <sub>41</sub>		327 (40)	315 (1)	$\delta$ de toda la molécula <sup>a,b,c</sup> (1) /A'
V <sub>42</sub>		299 (10)	284 (3)	$\delta$ de toda la molécula <sup>a,b,c</sup> (2)/A'
V <sub>43</sub>		227 (20)	254 (<1)	$\tau(\text{C-CH}_3)^{\text{b,c}}/\text{A}''$
V <sub>44</sub>		218 (22)	193 (<1)	aleteo de toda la molécula /A'
V <sub>45</sub>			184 (1)	$\tau_{\text{as}}(\text{O-CH}_3^{\text{a}} + \text{C-CH}_3^{\text{c}}) + \delta_{\text{oop}}(\text{N-O-C})^{\text{b}}$
V <sub>46</sub>		142 (55)	139 (<1)	$\delta_{\text{oop}}(\text{N-C-O})^{\text{b}} + \tau_{\text{s}}(\text{O-CH}_3^{\text{a}} + \text{C-CH}_3^{\text{c}})$
V <sub>47</sub>			105 (<1)	$\tau(\text{CH}_3)^{\text{a}}/\text{A}''$
V <sub>48</sub>			97 (<1)	torsión de toda la molécula /A'
V <sub>49</sub>			70 (<1)	$\tau(\text{O-C-C})^{\text{b,c}}/\text{A}''$
V <sub>50</sub>			60 (<1)	$\tau(\text{CH}_3)^{\text{a}} + \tau(\text{CH}_2\text{-CH}_2)^{\text{b,c}}(1)/\text{A}''$
V <sub>51</sub>			36 (<1)	$\tau(\text{CH}_3\text{-O})^{\text{a}} + \tau(\text{CH}_2\text{-CH}_2)^{\text{b,c}}(2)/\text{A}''$

<sup>a</sup> Metilo del resto metoxi de la molécula. <sup>b</sup> CH<sub>2</sub> del grupo etilo. <sup>c</sup> Metilo del grupo etilo de la molécula. <sup>d</sup> Intensidad de las bandas: vs =muy intenso, s =intenso, m = medio, sh =hombro, w = débil, vw =muy débil, vvw = muy muy débil; <sup>e</sup> sólido a temperatura ambiente, en paréntesis la intensidad Raman relativa (2,1 u. a. = 100 %); <sup>f</sup> En paréntesis la intensidad relativa de las bandas para la conformación más estable, (100% = 705.99 Km/mol (s-a-s-a)). (1) Movimiento simétrico del resto **b** respecto a **c** o el resto **a** respecto a **b/c**. (2) Movimiento antisimétrico del lado **b** respecto al **c** o del lado **a** respecto al **b/c**.

15.8 APÉNDICE VIII (ESPECTROS DE RMN BIDIMENSIONAL, HSQC)

15.8.1  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{S})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OCH}_3$

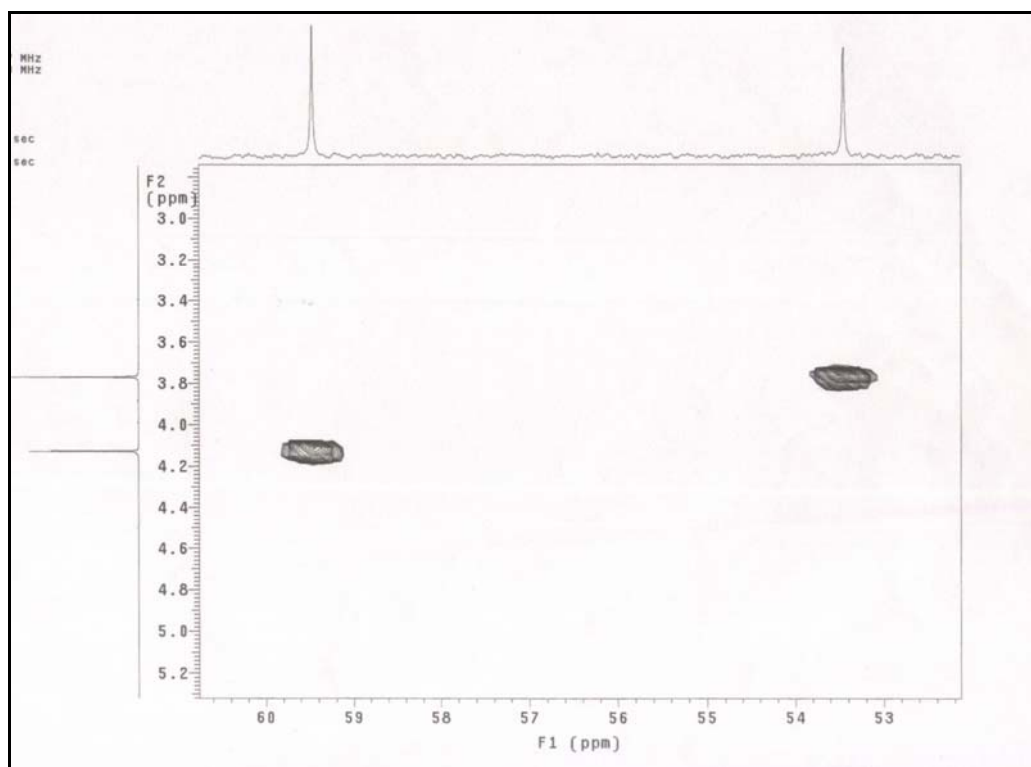


Figura 15.18 Espectro RMN bidimensional (HSQC) del  $\text{CH}_3\text{OC}(\text{S})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OCH}_3$

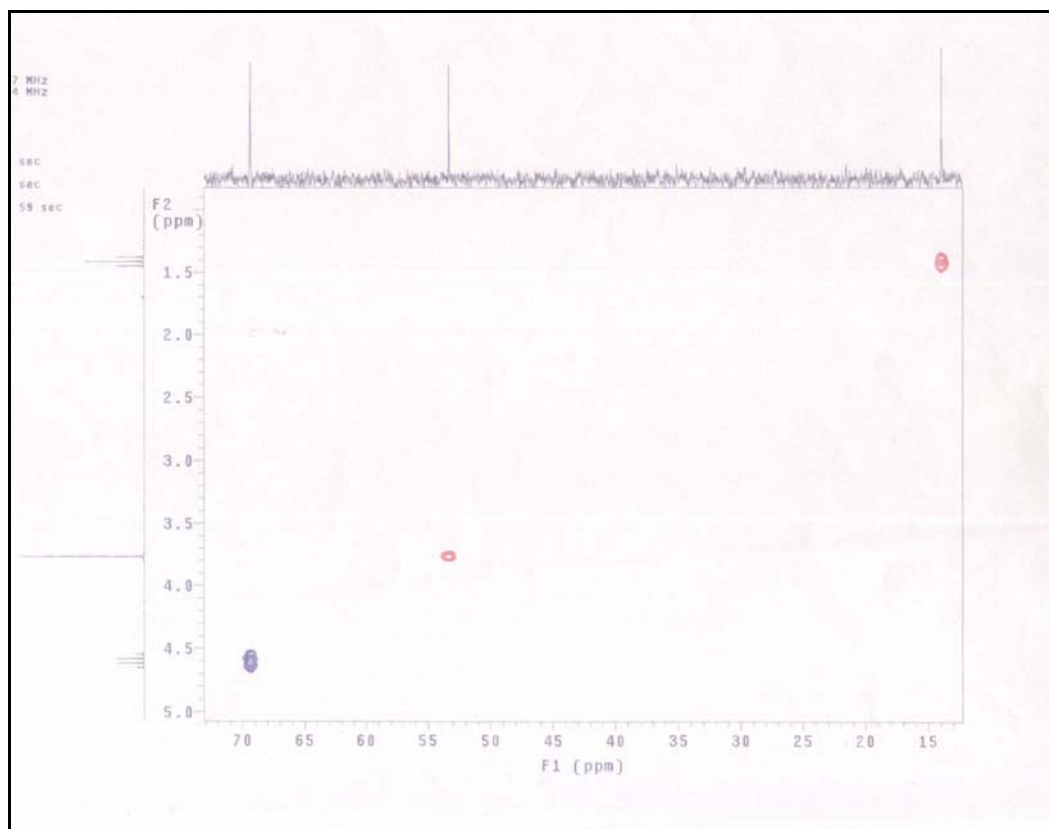
15.8.2  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(\text{S})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OCH}_3$ 

Figura 15.19 Espectro RMN bidimensional (HSQC) del  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OC}(\text{S})\text{N}(\text{H})\text{C}(\text{O})\text{OCH}_3$

## 15.9 REFERENCIAS

- [1] I. U. f. P. a. A. Chemistry, *Pure Appl. Chem.* **1976**, *45*, 11.
- [2] M. F. Erben, Universidad Nacional de La Plata (La Plata), **2005**.