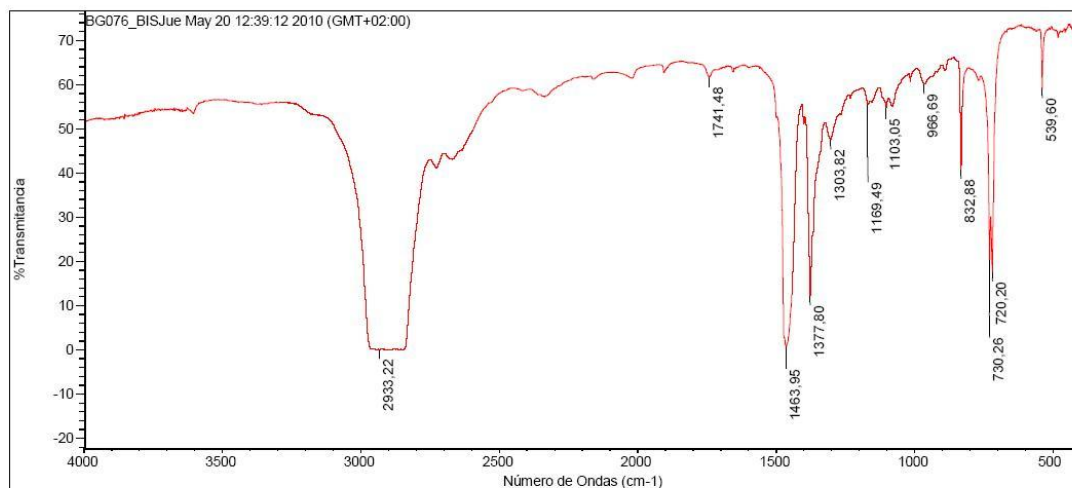


ANEXOS

ANEXO I : CARACTERIZACIÓN MEDIANTE IR

Espectro IR del 1,4-bis(vodoetnil)benceno.



Jue May 20 12:42:19 2010 (GMT+02:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: BG076 BISJue May 20 12:39:12 2010 (GMT+02:00)

Región: 4000,00 400,00

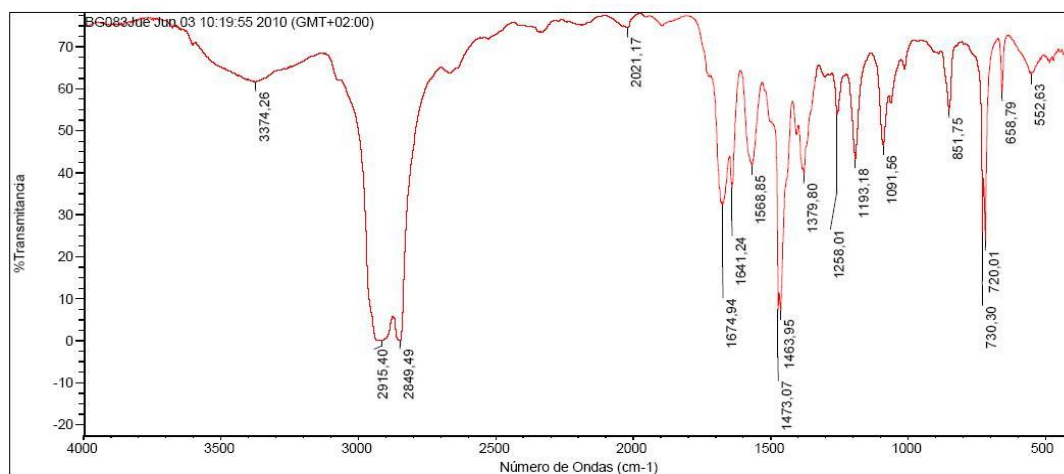
Umbral absoluto: 65,508

Sensibilidad: 50

Lista de picos:

Posición: 2933,22	Intensidad: -0,0597	Posición: 1103,05	Intensidad: 54,678
Posición: 1463,95	Intensidad: 0,682	Posición: 1169,49	Intensidad: 55,409
Posición: 1377,80	Intensidad: 12,140	Posición: 539,60	Intensidad: 58,963
Posición: 720,20	Intensidad: 17,680	Posición: 966,69	Intensidad: 60,115
Posición: 730,26	Intensidad: 20,248	Posición: 1741,48	Intensidad: 61,599
Posición: 832,88	Intensidad: 40,750		
Posición: 1303,82	Intensidad: 47,601		

Espectro de IR de la 4-deciloxipiridina



Jue Jun 03 10:23:13 2010 (GMT+02:00)

BUSCAR PICOS:

Espectros: BG083Jue Jun 03 10:19:55 2010 (GMT+02:00)

Región: 4000,00 400,00

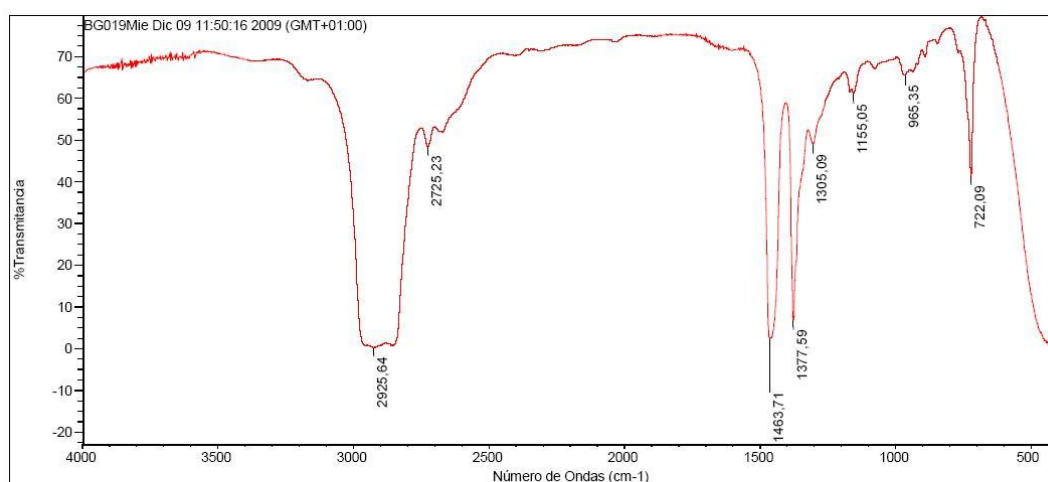
Umbral absoluto: 76,795

Sensibilidad: 50

Lista de picos:

Posición: 2915,40	Intensidad: 0,0253	Posición: 1641,24	Intensidad: 36,505
Posición: 2849,49	Intensidad: 0,0500	Posición: 1379,80	Intensidad: 39,687
Posición: 1463,95	Intensidad: 7,176	Posición: 1568,85	Intensidad: 41,782
Posición: 1473,07	Intensidad: 7,199	Posición: 1193,18	Intensidad: 43,188
Posición: 720,01	Intensidad: 23,648	Posición: 1091,56	Intensidad: 46,548
Posición: 730,30	Intensidad: 25,438	Posición: 1258,01	Intensidad: 53,927
Posición: 1674,94	Intensidad: 32,369	Posición: 851,75	Intensidad: 55,224
		Posición: 658,79	Intensidad: 59,308
		Posición: 3374,26	Intensidad: 61,564
		Posición: 552,63	Intensidad: 63,439
		Posición: 2021,17	Intensidad: 74,537

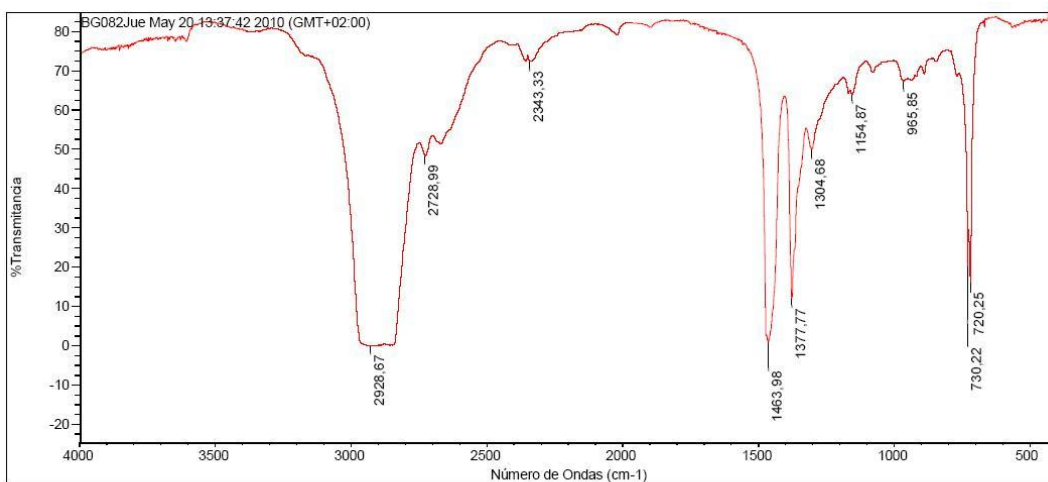
Espectro de IR del Nujol



Mie Dic 09 11:52:00 2009 (GMT+01:00)
 BUSCAR PICOS:
 Espectros: BG019Mie Dic 09 11:50:16 2009 (GMT+01:00)
 Región: 4000,00 400,00
 Umbral absoluto: 73,535
 Sensibilidad: 50
 Lista de picos:

Posición	Intensidad
2925,64	0,163
1463,71	2,347
1377,59	6,754
722,09	41,445
2725,23	48,436
1305,09	48,975
1155,05	61,063

Espectro de IR del Nujol en papel de polietileno

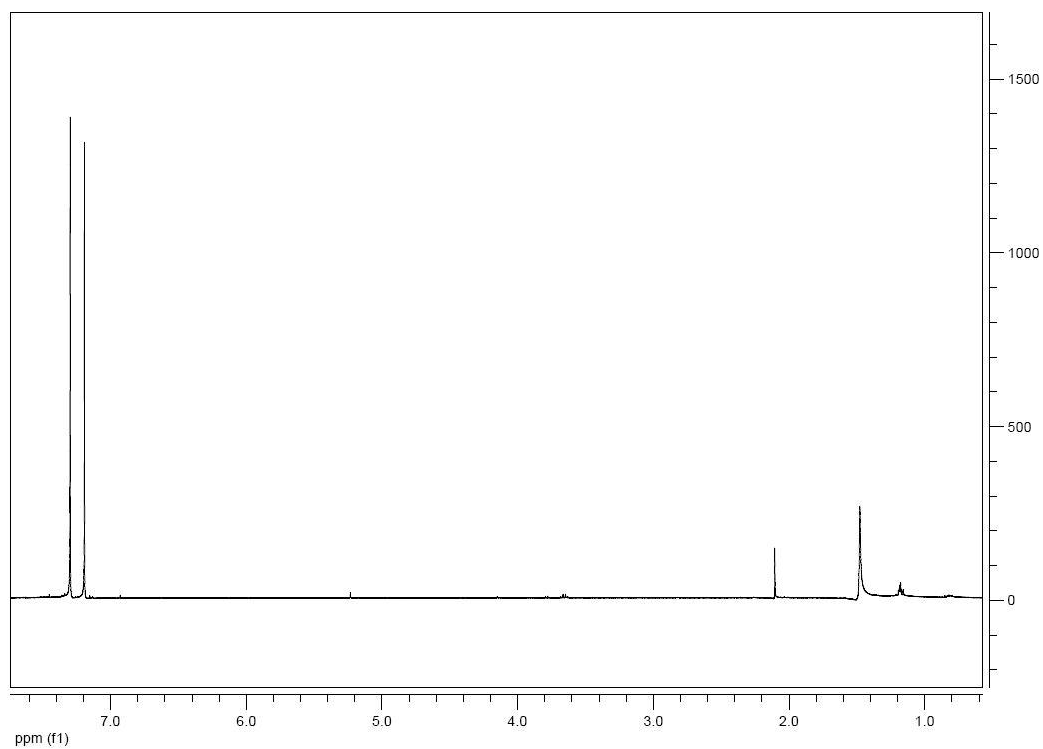


Jue May 20 13:39:34 2010 (GMT+02:00)
 BUSCAR PICOS:
 Espectros: BG082Jue May 20 13:37:42 2010 (GMT+02:00)
 Región: 4000,00 400,00
 Umbral absoluto: 81,328
 Sensibilidad: 50
 Lista de picos:

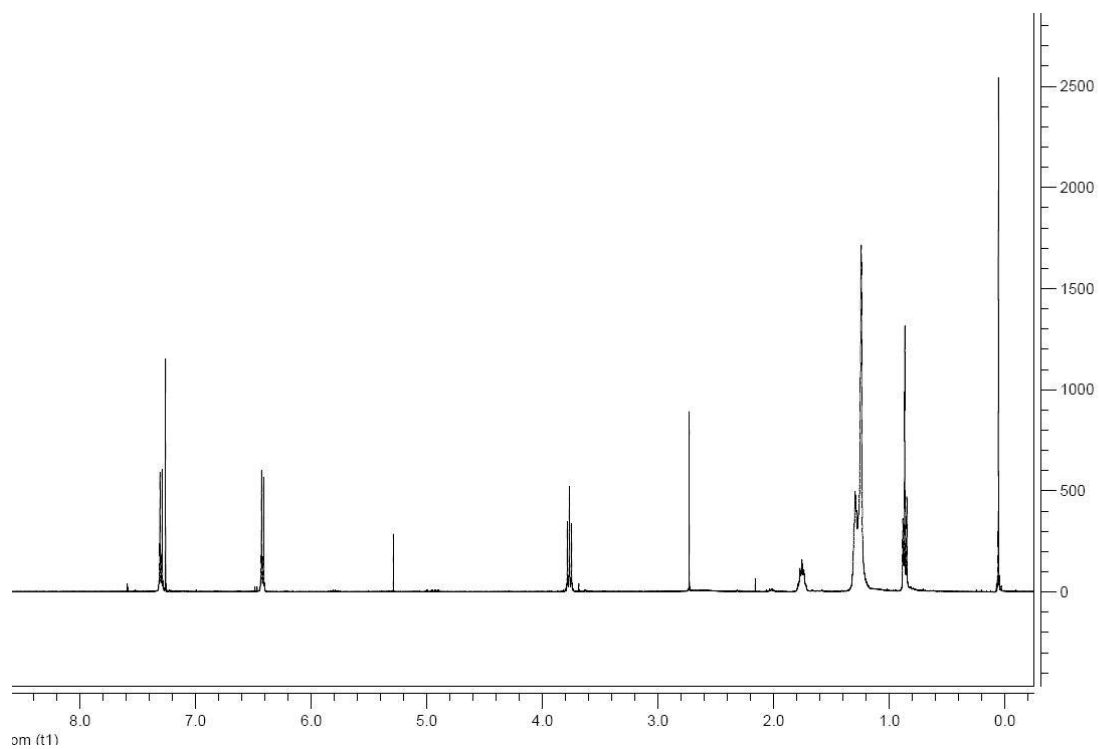
Posición	Intensidad	Posición	Intensidad
2928,67	-0,0611	1154,87	63,980
1463,98	0,863	965,85	67,124
1377,77	11,965	2343,33	72,311
720,25	16,132		
730,22	20,149		
2728,99	48,329		
1304,68	49,990		

ANEXO II: CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN

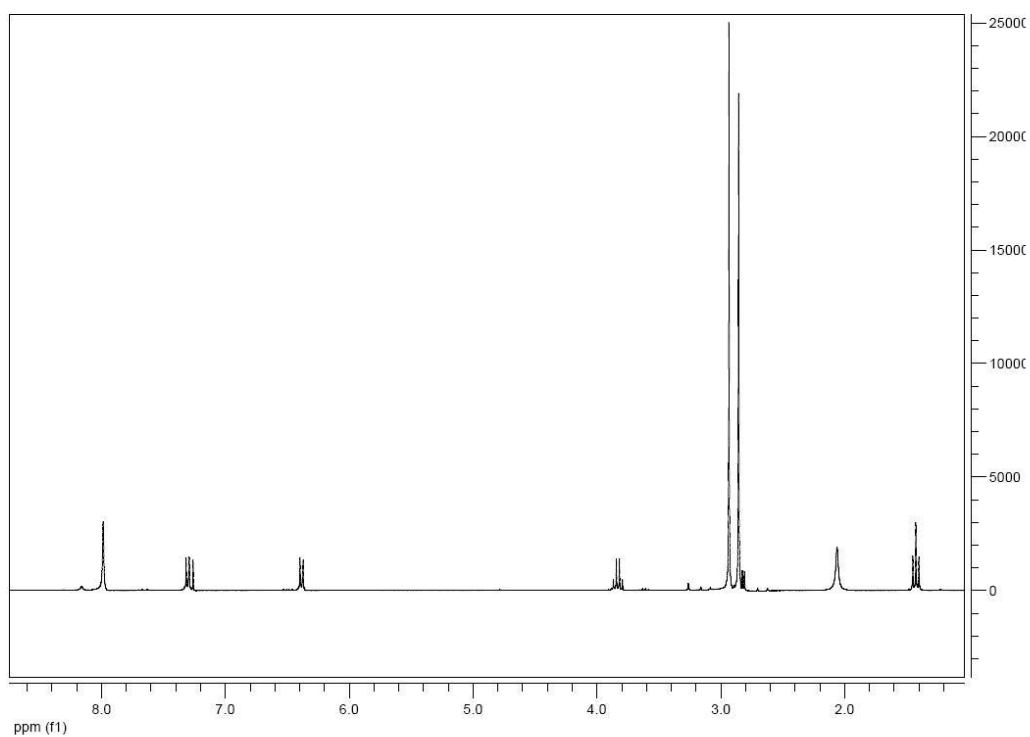
RMN del 1,4-bis(yodoetil)benzeno



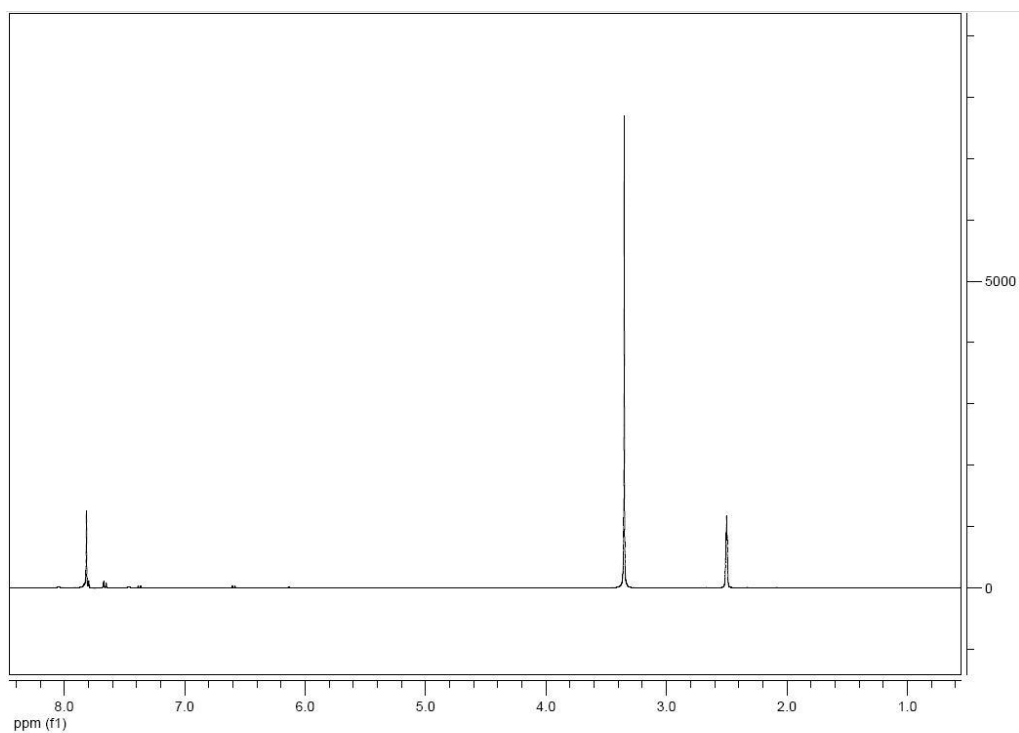
RMN de la 4-deciloxipiridina



RMN de la 4-etiloxipiridina

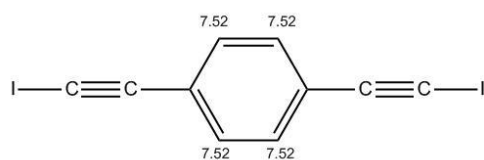


RMN COMPLEJO TRIAZOL-Cu^I

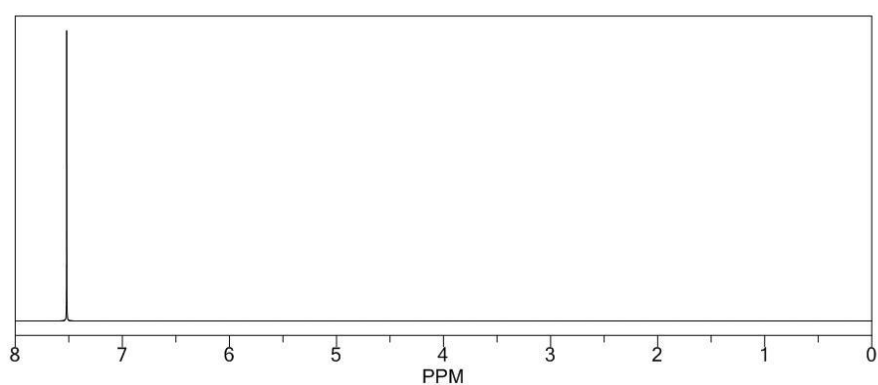


ANEXO III: RMN SIMULADOS MEDIANTE *CHEMBIODRAW ULTRA 12.0*

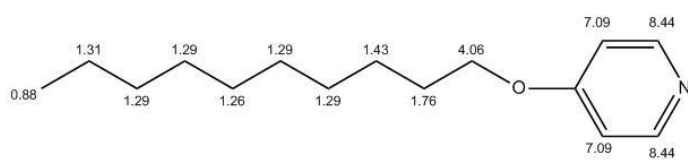
ChemNMR ^1H Estimation



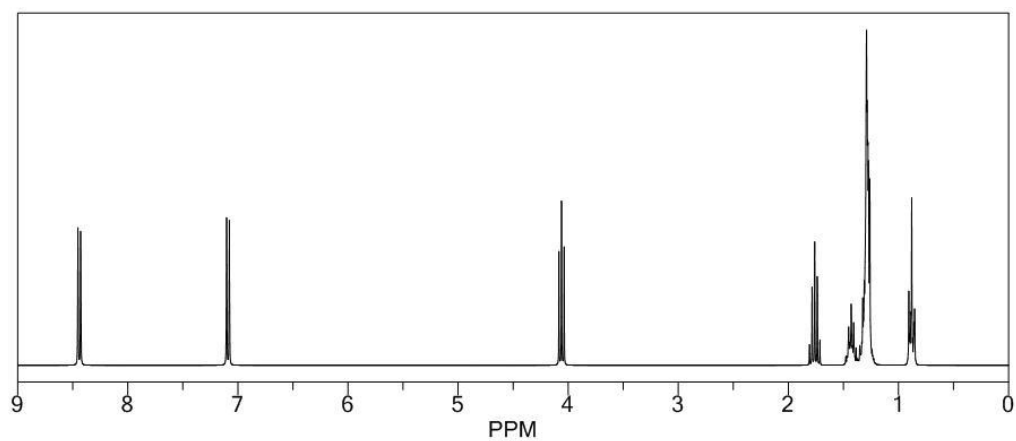
1,4-bis(yodoetnil)benceno



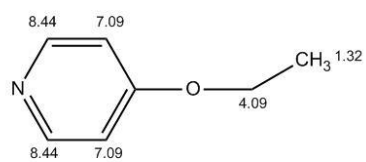
ChemNMR ^1H Estimation



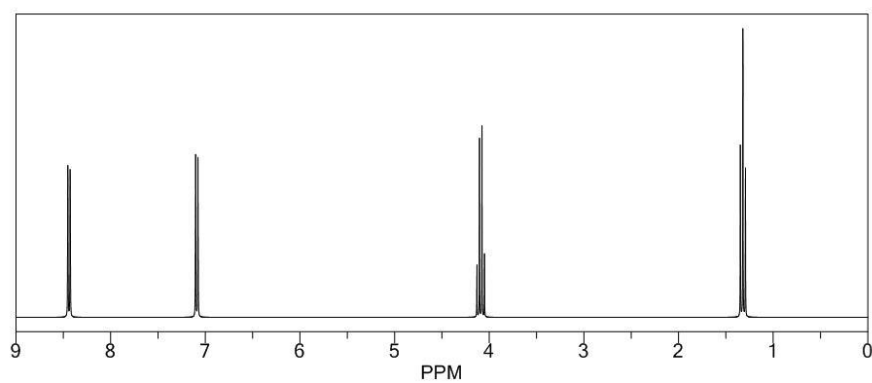
4-deciloxipiridina



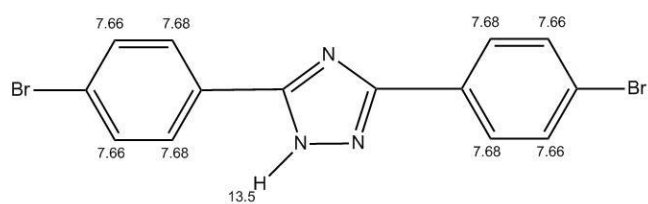
ChemNMR ¹H Estimation



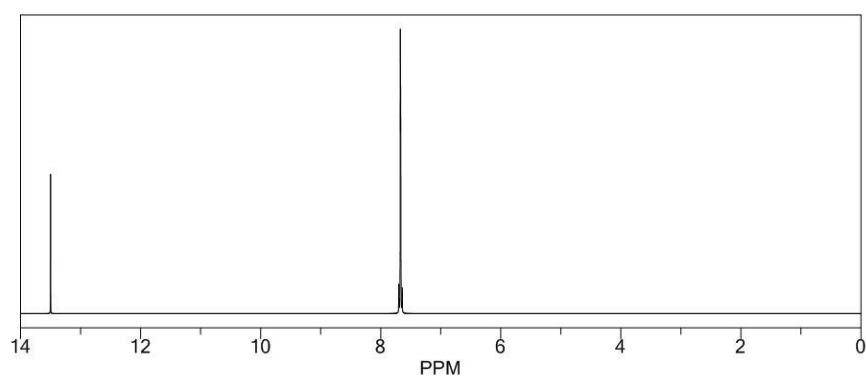
4-etiloxipiridina



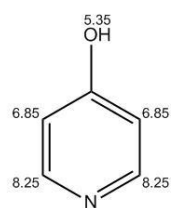
ChemNMR ¹H Estimation



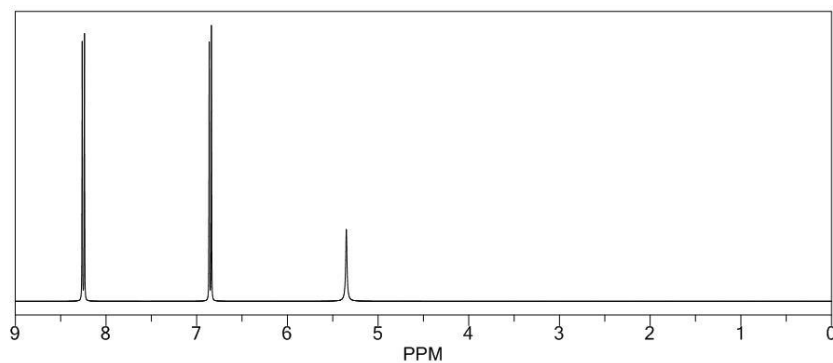
triazol



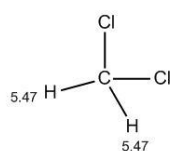
ChemNMR ^1H Estimation



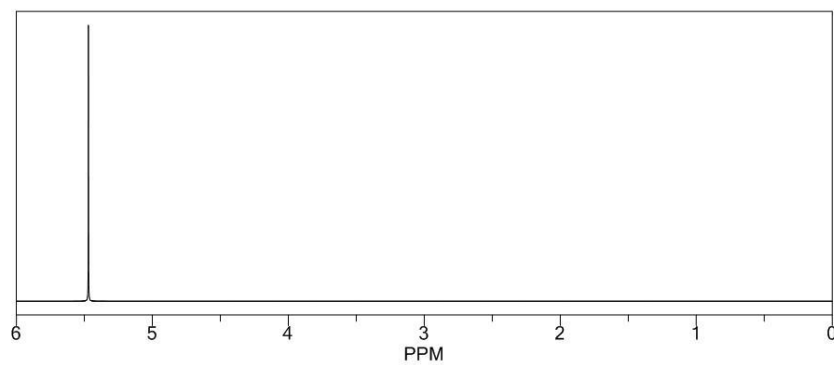
4-hidroxipiridina



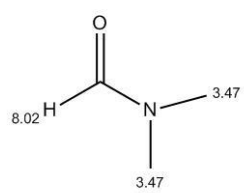
ChemNMR ^1H Estimation



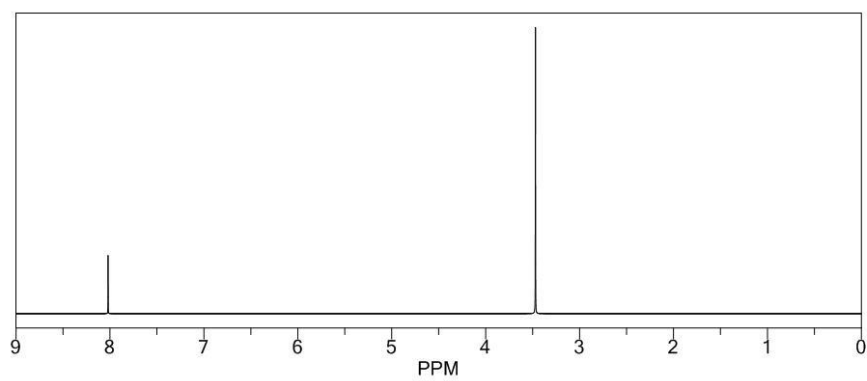
diclorometano



ChemNMR ¹H Estimation



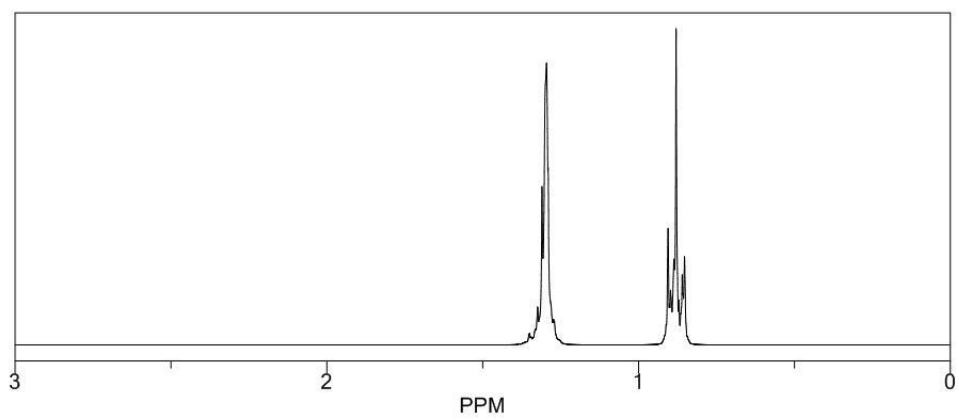
DMF



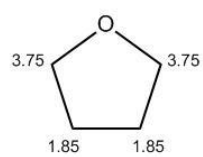
ChemNMR ¹H Estimation



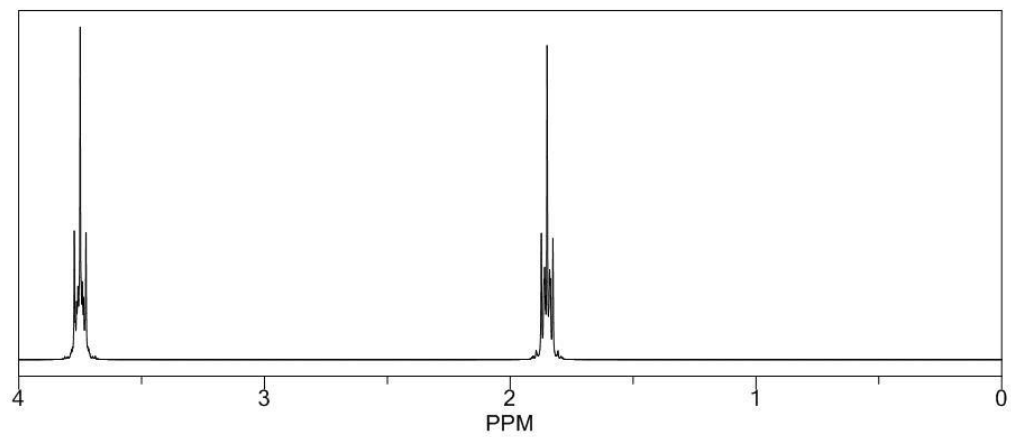
Hexano



ChemNMR ^1H Estimation



THF



ANEXO IV: DATOS Y RESOLUCIÓN DE LA ESTRUCTURA DE LOS CRISTALES DEL COMPUESTO 1

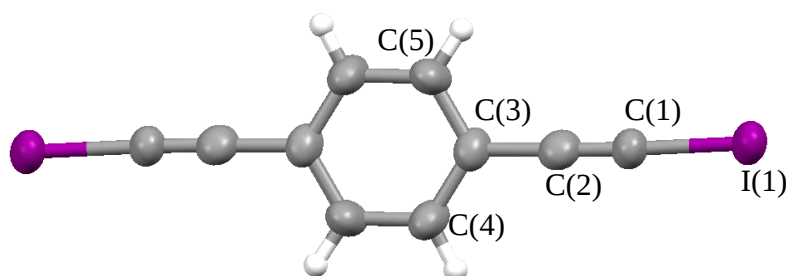


Tabla 3. Datos del cristal y de la resolución de la estructura del compuesto 1	
Fórmula empírica	C ₁₀ H ₁₀ I N ₂
Peso molecular	285.10
Temperatura	293(2) K
Longitud de onda	0.71073 Å
Sistema Cristalino	Monoclinic
Grupo espacial	P2(1)/n
Dimensiones celda unidad	a = 4.23900(10) Å; α = 90°.
	b = 17.3212(7) Å; β = 95.638(3)°.
	c = 7.0959(2) Å; γ = 90°.
Volumen	518.49(3) Å ³
Z	2
Densidad (calculada)	1.826 mg/m ³
Coefficiente de absorción	3.044 mm ⁻¹
F(000)	274
Tamaño del cristal	0.17 x 0.11 x 0.01 mm ³
Intervalo de toma de datos	3.12 to 28.56°.
Index ranges	-5 ≤ h ≤ 5, -21 ≤ k ≤ 23, -9 ≤ l ≤ 8
Reflexiones recogidas	10385
Reflexiones independientes	1228 [R(int) = 0.0510]
Completeness to theta = 28.71°	92.5 %
Corrección absorción	Semi-empirical from equivalents
Transmisión máxima y mínima	1.1394 and 0.7160
Método de refinamiento	Full-matrix least-squares on F ²
datos / restricciones / parametros	1228 / 0 / 63
Goodness-of-fit on F²	0.871
Índices R finales [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0344, wR2 = 0.0627
Índices R (todos los datos)	R1 = 0.0755, wR2 = 0.0683
Diferencia máxima de pico y hollo	1.027 and -0.460 e.Å ⁻³

Tabla 4. Coordenadas atómicas ($\times 10^4$) y parámetro de desplazamiento isotrópico ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para el cristal del compuesto 1. $U(\text{eq})$ está definida como un tercio de la señal del tensor ortogonalizado U^{ij} .

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(2)	2693(14)	5998(3)	7913(8)	52(1)
C(4)	1755(16)	5627(4)	4553(8)	58(2)
C(3)	1299(13)	5488(3)	6441(7)	48(1)
I(1)	5687(1)	7184(1)	10981(1)	58(1)
C(1)	3813(12)	6422(3)	9074(7)	49(1)
C(5)	-453(16)	4851(3)	6861(8)	58(2)

Tabla 5. Distancias de enlace [Å] y ángulos [°] para el cristal del compuesto 1.

C(2)-C(1)	1.169(7)
C(2)-C(3)	1.449(8)
C(4)-C(5)#1	1.374(8)
C(4)-C(3)	1.393(8)
C(3)-C(5)	1.379(8)
I(1)-C(1)	1.998(5)
C(5)-C(4)#1	1.374(8)
C(1)-C(2)-C(3)	178.6(6)
C(5)#1-C(4)-C(3)	121.0(6)
C(5)-C(3)-C(4)	118.3(5)
C(5)-C(3)-C(2)	121.5(5)
C(4)-C(3)-C(2)	120.2(5)
C(2)-C(1)-I(1)	177.6(5)
C(4)#1-C(5)-C(3)	120.7(6)

Para generar átomos equivalentes ha sido usada simetría de transformación:

#1 -x,-y+1,-z+1

ANEXO V: DATOS Y RESOLUCIÓN DE LA ESTRUCTURA DE LOS CRISTALES DEL COMPUESTO 1 CON HEXAMETILENTETRAAMINA

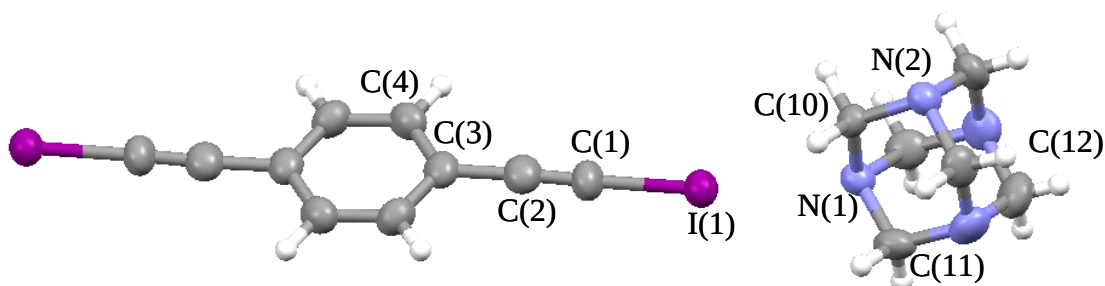


Tabla 6. Datos del cristal y de la resolución de la estructura del compuesto 1 con la hexametilentetraamina.

Fórmula empírica	C ₁₆ H ₁₆ I ₂ N ₄
Peso molecular	153.93
Temperatura	293(2) K
Longitud de onda	0.71073 Å
Sistema Cristalino	Orthorhombic
Grupo espacial	Cmcm
Dimensiones celda unidad	a = 9.2510(6) Å; α = 90°.
	b = 7.8618(4) Å; β = 90°.
	c = 23.920(11) Å; γ = 90°.
Volumen	1739.7(8) Å ³
Z	24
Densidad (calculada)	3.526 Mg/m ³
Coefficiente de absorción	10.708 mm ⁻¹
F(000)	1608
Tamaño del cristal	0.31 x 0.22 x 0.02 mm ³
Intervalo de toma de datos	3.40 to 28.71°.
Index ranges	-12 ≤ h ≤ 11, -9 ≤ k ≤ 9, -30 ≤ l ≤ 25
Reflexiones recogidas	5681
Reflexiones independientes	1109 [R(int) = 0.0359]
Completeness to theta = 28.71°	90.2 %
Corrección absorción	Semi-empirical from equivalents
Transmisión máxima y mínima	1.1549 and 0.7729
Método de refinamiento	Full-matrix least-squares on F ²
datos / restricciones / parametros	1109 / 0 / 81
Goodness-of-fit on F²	0.935
Índices R finales [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0267, wR2 = 0.0550
Índices R (todos los datos)	R1 = 0.0474, wR2 = 0.0592
Diferencia máxima de pico y hollo	0.530 and -0.410 e.Å ⁻³

Tabla 7. Coordenadas atómicas ($\times 10^4$) y parámetro de desplazamiento isotrópico ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) para el cristal del compuesto 1 con la hexametilentetraamina. $U(\text{eq})$ está definida como un tercio de la señal del tensor ortogonalizado U_{ij} .

	x	y	z	$U(\text{eq})$
I(1)	0	1692(1)	6233(1)	46(1)
N(1)	0	4501(5)	6988(2)	40(1)
C(1)	0	-574(6)	5829(2)	50(1)
N(2)	-1313(5)	6698(5)	7500	56(1)
C(2)	0	-1900(6)	5612(2)	53(1)
C(3)	0	-3502(6)	5310(2)	46(1)
C(4)	-1299(4)	-4264(4)	5155(2)	50(1)
C(10)	-1287(4)	5598(5)	7002(2)	52(1)
C(11)	0	7726(11)	7500	65(3)
C(12)	0	3487(8)	7500	38(2)

Tabla 8. Distancias de enlace [Å] y ángulos [°] para el cristal del compuesto 1 con la hexametilentetraamina.

I(1)-C(1)	2.026(5)
N(1)-C(12)	1.461(5)
N(1)-C(10)#1	1.471(4)
N(1)-C(10)	1.471(4)
C(1)-C(2)	1.165(7)
N(2)-C(11)	1.459(7)
N(2)-C(10)	1.472(4)
N(2)-C(10)#2	1.472(4)
C(2)-C(3)	1.451(7)
C(3)-C(4)	1.394(4)
C(3)-C(4)#1	1.394(4)
C(4)-C(4)#3	1.375(7)
C(11)-N(2)#4	1.459(6)
C(12)-N(1)#2	1.461(5)
C(12)-N(1)-C(10)#1	107.4(3)
C(12)-N(1)-C(10)	107.4(3)
C(10)#1-N(1)-C(10)	108.1(4)
C(2)-C(1)-I(1)	178.1(5)
C(11)-N(2)-C(10)	108.2(3)
C(11)-N(2)-C(10)#2	108.2(3)
C(10)-N(2)-C(10)#2	108.0(4)
C(1)-C(2)-C(3)	176.7(6)
C(4)-C(3)-C(4)#1	119.2(5)
C(4)-C(3)-C(2)	120.4(2)
C(4)#1-C(3)-C(2)	120.4(2)
C(4)#3-C(4)-C(3)	120.4(2)
N(1)-C(10)-N(2)	112.1(3)
N(2)-C(11)-N(2)#4	112.7(7)
N(1)#2-C(12)-N(1)	113.9(5)

Para generar átomos equivalentes ha sido usada simetría de transformación:

#1 -x,y,z #2 x,y,-z+3/2 #3 x,-y-1,-z+1 #4 -x,y,-z+3/2

ANEXO VI: GLOSARIO DE ABREVIATURAS DE COMPUESTOS

C.L.: Cristal Líquido

DAIB: diacetoxiyodobenceno

DIB: 1,4-diyodobenceno

DMF: dimetilformamida

F₄DIB: 1,4-diyodoperfluorobenceno

Hmta: hexametilenteraamina

IR: Infrarrojo

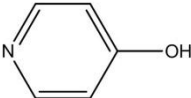
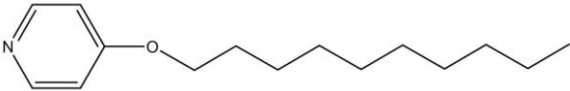
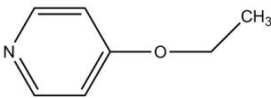
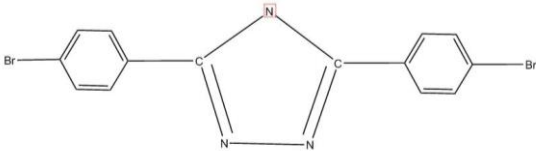
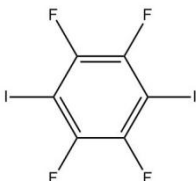
RMN: Resonancia Magnética Nuclear

TBAB: bromuro de tetrabutilamonio.

tBuOK: tercbutóxido de potasio

THF: tetrahidrofurano

ANEXO VII: GLOSARIO DE COMPUESTOS Y FÓRMULAS ESTRUCTURALES

COMPUESTO	FÓRMULA ESTRUCTURAL
1,4-dietinilbenceno .	
1,4-(bis)yodoetinilbenceno.	
4-hidroxipiridina	
4-deciloxipiridina	
4-etiloxipiridina	
triazol	
p-diyodobenceno	
p-diyodoperfluorobenceno	
hexametilentetraamina	