

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

Facultad de Química/Kimika Fakultatea

Grado en Química

TRABAJO FIN DE GRADO

Estudio teórico y experimental del efecto de túnel cuántico en la generación de hidrógeno

Autor: Alberto Pérez Pinedo

Dirigido por: Jon Mattin Matxain Beraza y Miguel Ángel Huertos Mansilla

San Sebastián, Julio de 2022



Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA



Índice

Resumen.....	5
Abstract	6
1. Introducción.....	7
1.1. Efecto túnel.....	7
1.2. Catálisis organometálica	10
1.3. Producción de hidrógeno y silanoles	12
2. Objetivos.....	15
3. Metodología	17
3.1. Metodología teórica	17
3.1.1.Fundamentos teóricos	17
3.1.2.Técnicas computacionales	20
3.1.3.Metodología específica.....	23
3.2. Metodología experimental	24
3.2.1.Condiciones generales de trabajo.....	24
3.2.2.Síntesis y caracterización de compuestos.....	24
3.2.3.Catálisis	26
4. Resultados y discusión.....	29
4.1. Resultados experimentales.....	29
4.1.1.Síntesis del ligando y complejos	29
4.1.2.Hidrólisis de $\text{Me}_2\text{PhSiH(D)}$ y $\text{Ph}_3\text{SiH(D)}$ catalizadas por 2-SGeS	36
4.1.3.Comparación de los datos cinéticos con los obtenidos previamente en el grupo.....	40
4.2. Resultados computacionales	42
4.3. Discusión experimental/teórica.....	47
Conclusiones	51
Conclusions	52
Bibliografía	53
Anexos.....	55



Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

Resumen

El efecto túnel es un fenómeno de gran interés en Mecánica Cuántica, ya que puede aumentar la velocidad a la que ocurre una reacción o incluso permitir que sucedan reacciones que de otro modo no serían posibles. En el ámbito de la química, entender mejor este efecto y las condiciones necesarias para que se lleve a cabo puede permitir desarrollar procesos más eficientes.

Este trabajo consiste en un estudio de la reacción de hidrólisis de silanos en presencia de tres complejos isoestructurales de iridio que actuarán como catalizadores $\{Ir[EMe(o-C_6H_4SMe)_2](H)(PPh_3)(THF)][BAR^F_4]\}$ (E=Si, **2-SSiS**; Ge, **2-SGeS**; C, **2-SCS**), resultando en la generación de hidrógeno. En trabajos anteriores se ha demostrado que, en la reacción de hidrólisis de silanos, al utilizar el catalizador organometálico de iridio **2-SSiS** que presenta una estructura octaédrica con una vacante o un ligando lábil en posición *trans* respecto a un átomo de silicio, se puede dar un efecto de túnel cuántico en la etapa limitante del proceso, acelerando así la reacción. Por este motivo, se ha decidido estudiar este efecto de manera tanto teórica como experimental. Para ello se ha decidido utilizar diferentes silanos y los diferentes catalizadores antes comentados.

Dentro de este trabajo pueden diferenciarse dos partes según el método de estudio: un estudio teórico mediante química computacional de las hidrólisis de trietilsilano, trifenilsilano y fenildimetilsilano en presencia de distintos catalizadores de iridio, y un estudio experimental de las hidrólisis de silanos catalizadas por el complejo **2-SGeS**. El estudio teórico nos ayudó a conocer los motivos por los que en unas reacciones es más sencillo que ocurra efecto túnel que en otras dependiendo de las especies que intervienen en el paso lento de la reacción. Por otro lado, el estudio experimental nos permitió conocer las constantes de velocidad de las reacciones y la posibilidad de que haya túnel de hidrógeno mediante el cálculo del efecto isotópico cinético. La suma de los resultados tanto teóricos como experimentales nos ha permitido empezar a comprender los factores necesarios para que un efecto de túnel cuántico tenga lugar en esta reacción.

Abstract

Tunneling effect is a phenomenon of interest in Quantum Mechanics. This effect can increase the reaction rate or help reactions to take place when classical mechanics make this impossible. In chemistry, a better understanding of this effect and the conditions necessary for it to take place can lead to the development of more efficient processes.

In this work, we report the hydrogen generation by hydrolysis of silanes catalyzed by three isostructural cationic iridium(III) complexes $\{\text{Ir}[\text{EMe}(\text{o-C}_6\text{H}_4\text{SMe})_2](\text{H})(\text{PPh}_3)(\text{THF})\}[\text{BAR}^{\text{F}}_4]$ (**E**=Si, **2-SSiS**; Ge, **2-SGeS**; C, **2-SCS**). Previous work has shown that using the organometallic iridium catalyst **2-SSiS**, which has an octahedral structure with a vacancy or labile ligand in the trans position with respect to a silicon atom, a quantum tunneling effect participate in the rate determining step of the reaction. For this reason, we have decided to study both theoretically and experimentally this effect.

In this work two parts can be differentiated according to the study method: a theoretical study using computational chemistry of the hydrolysis of triphenylsilane and phenyldimethylsilane in the presence of different iridium catalysts, and an experimental study of the hydrolysis of silanes catalyzed by **2-SGeS**. The theoretical study helped us to understand when and why the tunnel effect participate, depending on the species involved in the rate determining step of the reaction. By other way, the experimental study is necessary to obtain the experimental reaction rates and the probability of quantum tunneling by kinetic isotope effect measures. We are able to understand the factors necessary for hydrogen tunneling take place in this reaction based on the theoretical and experimental results.

1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la cooperación entre diversas ramas científicas resulta muy común a la hora de realizar un proyecto científico, ya que en su realización son necesarios conocimientos propios de diferentes ámbitos. En este Trabajo de Fin de Grado (TFG), se puede comprobar que distintos conceptos como el efecto túnel cuántico, la catálisis homogénea mediante catalizadores organometálicos y la producción de hidrógeno y silanoles pueden no ser tan distantes como se podría suponer.

1.1 Efecto túnel

Según la mecánica clásica, no es posible que una partícula atraviese una barrera de energía potencial cuya energía sea mayor que la energía de la propia partícula. Por lo tanto, un átomo o una molécula que no pueda superar la energía de activación necesaria para que tenga lugar una reacción, no reaccionará. Sin embargo, existen numerosos casos en los que esto no se cumple, y corresponde a la mecánica cuántica explicar lo que la mecánica clásica no puede. Se conoce como efecto túnel al fenómeno cuántico que tiene lugar cuando una partícula consigue atravesar una barrera de potencial de mayor energía que ella,^[1] tal como puede observarse en la Figura 1.1. Este fenómeno es más común cuanto menor sea la masa de la partícula que lo sufre, por lo que fuera de la escala cuántica no es posible encontrar casos de este fenómeno.

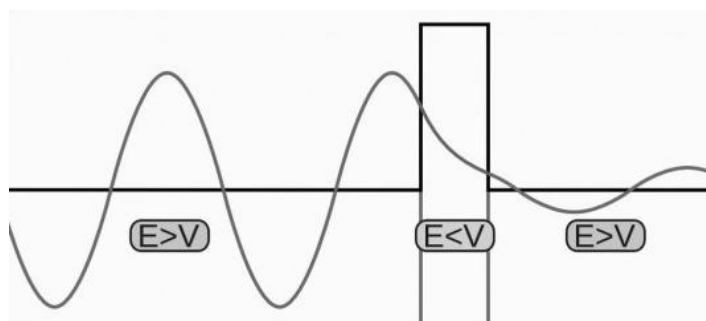


Figura 1.1: Representación de una partícula atravesando una barrera de potencial mediante efecto túnel.

El efecto túnel fue descubierto en 1927 por Friedrich Hund con una publicación en tres partes donde calculaba el estado fundamental de un doble pozo de potencial.^[1-2] Ese mismo año,

Ralph Fowler y Lothar Nordheim, tras estudiar la emisión de electrones a partir de metales a elevadas temperaturas, pudieron comprobar la importancia de la penetración en la barrera de potencial en caso que la emisión tuviera lugar si el metal se encontraba bajo un campo eléctrico.^[2-3] En 1928, Robert Oppenheimer explicaba en un artículo sobre el espectro energético del hidrógeno, el papel que desempeña el efecto túnel en la ionización del hidrógeno al someterse a un campo eléctrico uniforme.^[2-3] También en 1928, George Gamow publicó un estudio donde explicaba la radiación α en átomos, conocida por la emisión de núcleos de Helio, conocidas en este caso como partículas α , como se muestra en la figura 1.2. Gamow pudo demostrar la relación entre la energía de emisión de las partículas α y el tiempo de vida medio de los núcleos, además de la presencia de efecto túnel en la emisión de este tipo de partículas.^[2-4] De forma independiente prácticamente simultánea a Gamow, Ronald Gurney y Edward Condon también estudiaban la radiación α desde el punto de vista de la cuántica.^[2-4] Más tarde, trataron de comprender si sería posible desintegrar el núcleo atómico partiendo de los resultados que obtuvieron anteriormente, y pese a que llegaron a la conclusión que sería posible la penetración del núcleo con partículas α , no desarrollaron esta idea.^[4]

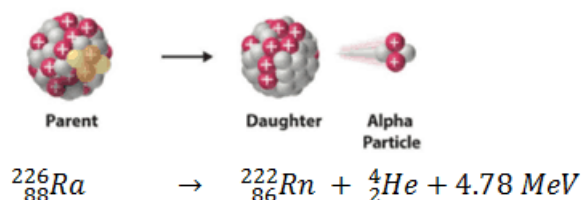


Figura 1.2: Ejemplo de emisión de partícula α desde un átomo de radio.

El efecto túnel juega un importante papel en diversos ámbitos, como puede ser el estudio del espacio, en concreto en la fusión nuclear que tiene lugar en las estrellas, distintas reacciones que suceden a lo largo del espacio o incluso el origen del Universo, en biología, en las reacciones enzimáticas que suceden en los seres vivos, en catálisis organometálica, etc. En las estrellas, por ejemplo, la energía necesaria para que los núcleos que la conforman se acerquen lo suficiente y pueda llevarse a cabo el proceso de nucleosíntesis de otros elementos, observable en la figura 1.3, es tan elevada (MeV), principalmente debido a la alta repulsión electrostática entre dichos núcleos, que incluso aquellos núcleos que posean una energía cinética superior a la media (keV) no pueden superar la barrera.^[5] Esto indica que únicamente

a través del efecto túnel puede suceder la fusión en las estrellas, provocando la generación de energía que permite que exista vida en la Tierra. Permite, además, comprender la mayor vida media de las estrellas más pequeñas: en ellas, la probabilidad de que tenga lugar efecto túnel es menor, su emisión de energía es por tanto menor que en estrellas de mayor masa, pero su duración aumenta.^[5] Por otro lado, en algunas regiones del espacio la temperatura puede llegar a alcanzar valores extremadamente bajos, por lo que ningún átomo o molécula posee la energía necesaria para superar una barrera de potencial. En estos casos, solamente mediante efecto túnel puede suceder una reacción.^[1]

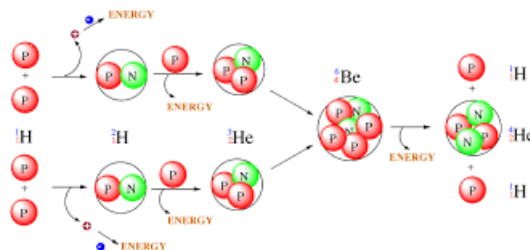


Figura 1.3: Desarrollo de la fusión nuclear para la formación de Helio.

Cabe mencionar que, aunque no sea un tema que vaya a ser desarrollado en este trabajo, desde un punto de vista físico también es posible observar casos de efecto túnel: Aleksandr Vilenkin postuló una teoría en 1982 en la que explica que el universo pudo haber surgido de la nada a través de este efecto túnel.^[6]

En el ámbito de la biología, Per-Olov Löwdin estudió errores genéticos dados durante la duplicación del DNA, cuya estructura de doble hélice queda reflejada en la figura 1.4, y explicó cómo mediante efecto túnel podía darse el caso de una transferencia del protón que une las dos hebras, creándose por ello las formas tautoméricas de las bases originales. Las consecuencias de esta transferencia de protón pueden llevar a mutaciones, y en algunos casos es posible que incluso causen la aparición de tumores.^[7]

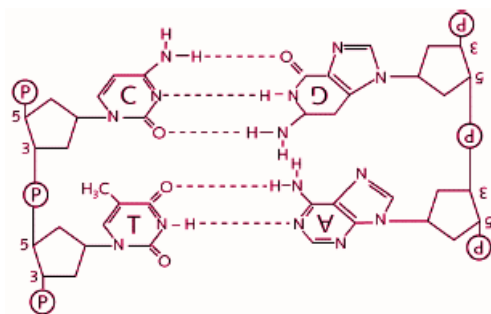


Figura 1.4: Esquema de la unión de dos hebras de DNA mediante enlace de hidrógeno.

La presencia de efecto túnel en reacciones enzimáticas supuso un cambio en el estudio del funcionamiento de las enzimas. Previo a este descubrimiento, se pensaba que únicamente en casos donde los sustratos tuvieran la energía suficiente para superar la barrera de potencial podría suceder una reacción enzimática, como indicaba la teoría del estado de transición (TST por sus siglas en inglés), por lo que la altura de la barrera de potencial y la temperatura de reacción eran determinantes en la reacción. Tras comprender el papel del efecto túnel en este tipo de reacciones, sobre todo en aquellas que cuentan con la transferencia de electrones o átomos de hidrógeno, ya sea en forma de hidruros, radicales o protones, se concluyó que a bajas temperaturas, cuando la reacción no puede suceder según indica la TST, es la anchura de la barrera la que determina si tiene lugar la reacción, y no la altura.^[8]

1.2 Catálisis organometálica

La catálisis es un campo de la química de gran importancia para la síntesis de diversas moléculas orgánicas, y sus avances han provocado grandes cambios en campos como la farmacología gracias al descubrimiento y desarrollo de nuevas reacciones, como puede ser la conversión selectiva de un enlace C-H en un nuevo enlace C-C, C-N o C-O.^[9]

Este es un ámbito que sido ampliamente estudiado a lo largo del tiempo. Fue a principios del siglo XX cuando comenzaron a utilizarse metales y compuestos organometálicos en catálisis: Paul Sabatier, que utilizó níquel pulverizado como catalizador para la hidrogenación heterogénea de olefinas, y Victor Grignard, descubridor del conocido reactivo de Grignard, compartieron por sus investigaciones el Premio Nobel de Química en 1912.^[10] El proceso Fischer-Tropsch, uno de los primeros procesos de obtención de biocombustible que fue inventado en Alemania durante la década de 1920, permitió en primer lugar la obtención de

syngas, una mezcla de CO e hidrógeno, a partir de carbón y vapor de agua, para más tarde obtener hidrocarburos a partir del propio syngas, utilizando para ello un catalizador de cobalto.^[11]

Entre los catalizadores organometálicos, aquellos formados por iridio no destacaron en un primer momento, debido principalmente a que su actividad en catálisis heterogénea no era tan buena como con platino u otros metales.^[12] Sin embargo, con el transcurso de los años se llevaron a cabo diversos estudios en los que se comenzaba a apreciar la utilidad que poseían ciertos compuestos de iridio. En 1961, Lauri Vaska y John W. Diluzio estudiaron el complejo *trans*-[IrCl(CO)(PPh₃)₂], actualmente conocido como complejo de Vaska, lo que les permitió comprender la adición oxidativa.^[13] El complejo [Ir(cod)(PCy₃)(py)]⁺[PF₆]⁻ presente en la figura 1.5 junto al complejo de Vaska que fue desarrollado por Robert H. Crabtree durante la década de 1970, resultó ser de gran eficacia en la hidrogenación de olefinas, e incluso hoy en día sigue siendo utilizado en síntesis enantioselectivas.^[14]

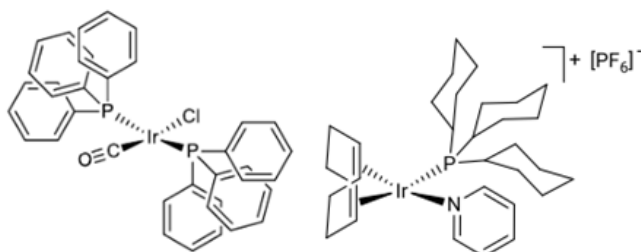


Figura 1.5: Estructura de los complejos de Vaska (izquierda) y de Crabtree (derecha).

Muchos de los catalizadores de iridio han demostrado que poseen una elevada actividad catalítica cuando son utilizados en presencia de disolventes poco coordinantes como puede ser el diclorometano.^[10] Entre sus aplicaciones destacan, además de las previamente mencionadas, la obtención de grupos carbonilo a partir de la oxidación de alcoholes,^[11] la reducción de cetonas y aldehídos, la deshidrogenación selectiva de alcanos para obtener olefinas,^[15] así como la hidrogenación de iminas y la síntesis de ésteres a partir de aldehídos.^[10]

1.3 Generación de hidrógeno y silanoles

Debido a la mayor concienciación sobre los efectos negativos que supone el uso del petróleo y sus derivados en el medio ambiente y a su creciente escasez, ha aumentado en los últimos años el interés en la búsqueda de alternativas: en la generación de energía, cada vez es más frecuente el uso de fuentes renovables para sustituir al uso de petróleo o carbón. A su vez, existen distintas alternativas a los derivados del petróleo que son utilizados como combustibles y que no resulten tan contaminantes, siendo una de estas alternativas el hidrógeno. Sin embargo, el hidrógeno posee ciertas desventajas: no es posible encontrarlo en la naturaleza y es difícil de almacenar. Por estos motivos, hoy en día se estudian formas cada vez más eficaces de generar este gas.

Entre los distintos métodos de generación de hidrógeno se encuentran algunas reacciones catalizadas por compuestos de iridio, destacando entre las reacciones más utilizadas para este tipo de obtención de hidrógeno, la deshidrogenación de borazano,^[17] de metanol,^[18] el cual puede ser obtenido a partir de biomasa, o de algunos tipos de silanos.^[19] En este último caso, pese a no ser el más común, presenta distintas ventajas. Es cinéticamente muy eficaz, generándose hidrógeno rápidamente, su almacenaje es sencillo y se generan silanoles además de hidrógeno, que pueden ser utilizados posteriormente para la síntesis de siliconas.^[19]

En el grupo donde se ha realizado este TFG, se ha estudiado la hidrólisis de trietilsilano en presencia de un catalizador organometálico de iridio, cuyo perfil de reacción se muestra en la figura 1.6. En él, quedó demostrado lo importante que resultaba el efecto túnel en la etapa limitante del proceso (RDS por sus siglas en inglés) para que tuviera lugar la reacción, siendo esta etapa limitante la obtención de C_1 a partir de C_0 (figura 1.6).

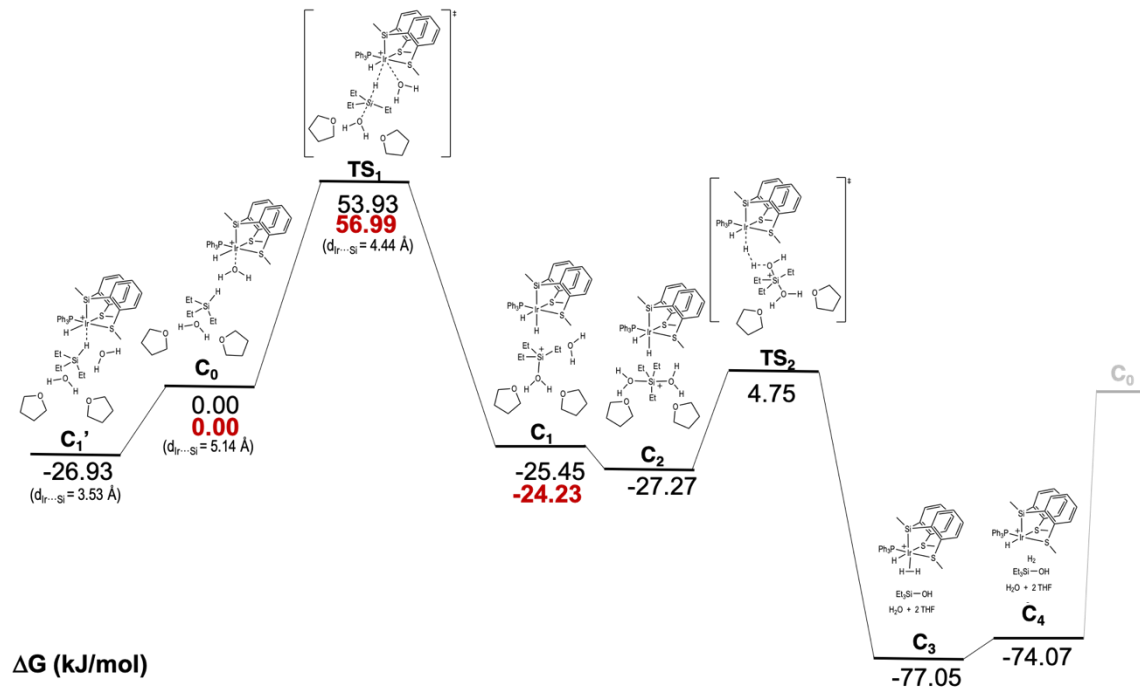


Figura 1.6: Perfil de reacción de la hidrólisis de trietilsilano con ayuda del catalizador **2-SSiS** con los valores de sus energías libres de Gibbs en kJ/mol. Los valores mostrados en rojo corresponden a trietilsilano deuterado.



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

2. Objetivos

El objetivo general de este trabajo es intentar entender que factores influyen para que en la hidrólisis de silanos catalizada por complejos de iridio(III) se dé o no un túnel de hidrógeno.

Para poder alcanzar este objetivo se han marcado varios objetivos específicos:

- Sintetizar un complejo **2-SGeS** análogo al previamente publicado **2-SSiS**.
- Realizar las hidrólisis de Me_2PhSiH y Ph_3SiH y sus derivados deuterados catalizada por **2-SGeS**. Calcular las constantes de velocidad experimentales y los efectos isotópicos cinéticos (KIEs). Comparar los resultados obtenidos con los previamente publicados.
- Mediante cálculos DFT, calcular los intermedios y los estados de transición del paso lento de la reacción (C_0 , TS_1 y C_1) para los complejos **2-SSiS**, **2-SGeS** y **2-SCS** y los silanos Et_3SiH , Me_2PhSiH y Ph_3SiH . Con estas estructuras optimizadas se calcularán las distancias de enlace y las cargas importantes en nuestro estudio.
- Unificar los resultados teóricos y los experimentales con el fin de concluir algún factor clave en la aparición de túnel cuántico en estas reacciones.



Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

3. METODOLOGÍA

3.1 Metodología computacional

A continuación, se explicarán los fundamentos teóricos de la mecánica cuántica que se han aplicado durante este trabajo, las técnicas computacionales necesarias para su realización, y la metodología específica utilizada.

3.1.1 Fundamentos teóricos

En esta subsección se detallarán los fundamentos teóricos de química cuántica o computacional, es decir, la mecánica cuántica aplicada a la química en los que se basa este trabajo, como la ecuación de Schrödinger, la aproximación Born-Oppenheimer y la Superficie de Energía Potencial.

Ecuación de Schrödinger

La aparición de la Mecánica Cuántica a principios del siglo XX permitió encontrar una explicación a diversos problemas en sistemas microscópicos que, únicamente con la Mecánica Clásica, quedaban sin poder resolverse. En el desarrollo de esta nueva rama de la física influyeron varias personas, entre las que destacan Max Planck al asumir que la energía se encontraba limitada a ciertos valores (energía cuantizada), Werner Heisenberg al postular su Principio de Incertidumbre, en el que explica que es imposible determinar simultáneamente a dos variables complementarias como pueden ser el momento y la posición de una partícula, y Erwin Schrödinger con su ecuación, que permite describir las variaciones en un sistema físico.

Todas las propiedades observables de un sistema físico están contenidas en su función de onda Ψ dependiente de la posición (q) de las partículas que componen el sistema y del tiempo (t). Aplicando la ecuación de Schrödinger para conocer las variaciones en el sistema con el tiempo se obtiene la ecuación 3.1:

$$\hat{H}\Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t) \quad (3.1)$$

Siendo \hat{H} el operador Hamiltoniano y \hbar la constante reducida de Planck. En casos donde el sistema se encuentre en estado estacionario, el Hamiltoniano dependerá únicamente de la

posición, y no del tiempo. Cuando esto sucede, y el sistema a estudiar es una molécula, puede expresarse al Hamiltoniano no relativista de la forma expresada en la ecuación 3.2:

$$\hat{H}(r_i, R_\alpha) = \hat{K}_N(R_\alpha) + \hat{K}_e(r_i) + \hat{V}_{NN}(R_\alpha) + \hat{V}_{ee}(r_i) + \hat{V}_{eN}(r_i, R_\alpha) \quad (3.2)$$

Siendo r_i y R_α las posiciones del electrón y del núcleo respectivamente, \hat{K}_N y \hat{K}_e los operadores de la energía cinética correspondientes a los núcleos y los electrones de la molécula, y \hat{V}_{NN} , \hat{V}_{ee} y \hat{V}_{eN} los operadores de energía potencial entre núcleos, entre electrones, y entre ambos. Al aplicar esta expresión del Hamiltoniano a la ecuación de Schrödinger, se obtiene la ecuación 3.3, en la que:

$$\hat{H}\Psi(q) = [\hat{K}_N(R_\alpha) + \hat{K}_e(r_i) + \hat{V}_{NN}(R_\alpha) + \hat{V}_{ee}(r_i) + \hat{V}_{eN}(r_i, R_\alpha)] \Psi(q) = E\Psi(q) \quad (3.3)$$

Aproximación Born-Oppenheimer

La ecuación de Schrödinger solo puede resolverse de manera exacta para átomos hidrogenoides, es decir, que posean un único electrón. En casos de moléculas con más de un electrón, es necesario recurrir a aproximaciones que permitan su resolución.

Teniendo en cuenta la mayor masa que posee el núcleo de un átomo en relación a los electrones, su velocidad será notablemente menor. Es en este concepto en el que se basa la aproximación de Born-Oppenheimer, en la cual se considera que los núcleos están fijos en comparación con los electrones. Esto provoca que los movimientos de los núcleos y los electrones estén desacoplados entre sí, lo que permite diferenciar entre dos funciones de onda, electrónica y nuclear, cada una con su correspondiente operador Hamiltoniano, como queda reflejado en la ecuación 3.4.

$$\Psi(r_i, R_\alpha) = \psi_e(r_i; R_\alpha)\psi_N(R_\alpha) \quad (3.4)$$

Por tanto, el operador Hamiltoniano electrónico se expresa como:

$$\hat{H}_e = \hat{K}_e(r_i) + \hat{V}_{ee}(r_i) + \hat{V}_{eN}(r_i; R_\alpha) \quad (3.5)$$

y al introducir la expresión de la ecuación 3.5 en la ecuación de Schrödinger para la función de onda electrónica, se obtiene la ecuación 3.6:

$$\hat{H}_e\psi_e = [\hat{K}_e(r_i) + \hat{V}_{ee}(r_i) + \hat{V}_{eN}(r_i; R_\alpha)]\psi_e = E_e\psi_e \quad (3.6)$$

Al considerar que los núcleos se encuentran fijos, su energía cinética es nula. Por tanto, si se suman la energía electrónica E_e y la energía potencial de los núcleos, como sucede en la ecuación 3.7, se obtiene el valor de la energía electrónica total del sistema:

$$U(R_\alpha) = E_e(r_i; R_\alpha) + V_{NN}(R_\alpha) \quad (3.7)$$

Respecto a la función de onda nuclear, su correspondiente operador Hamiltoniano se expresa como indica la ecuación 3.8:

$$\hat{H}_N(R_\alpha) = \hat{K}_N(R_\alpha) + U(R_\alpha) \quad (3.8)$$

por lo que, tal como se expresa en la ecuación 3.9, con la ecuación de Schrödinger nuclear se puede obtener el valor de la energía total de la molécula:

$$\hat{H}_N(R_\alpha)\psi_N(R_\alpha) = E_{tot}(R_\alpha)\psi_N(R_\alpha) \quad (3.9)$$

Superficie de energía potencial

Mediante la ecuación de Schrödinger electrónica es posible obtener la energía potencial de una molécula. Esta energía potencial se define como la energía que posee una molécula en una geometría exacta, determinada por la posición de los núcleos que la componen y considerando que éstos se encuentran fijos, lo que concuerda con la $U(R_\alpha)$ previamente calculada.

Cabe resaltar que la energía potencial de una molécula compuesta por n átomos es función de $3n-5$ variables si es lineal y de $3n-6$ variables si no lo es, por lo que para poder calcular la superficie de energía potencial, indicadora de la reactividad del sistema, es necesario reducir el número de variables a las más representativas, ya que de otra forma, la representación puede resultar inviable.

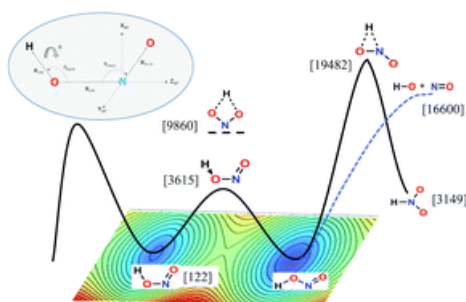


Figura 3.1: Superficie de energía potencial de la molécula, representando su energía potencial frente a la distancia de enlace y el ángulo de sus átomos que sean de mayor relevancia.

Tanto los reactivos como los productos poseen bajos niveles de energía, como se observa en la figura 3.1. Sin embargo, durante la reacción se forma un complejo de mayor energía entre los reactivos, conocido como estado de transición, que posee un tiempo de vida muy corto. La diferencia de energía entre los reactivos y este estado de transición (ΔG^{TS}) es conocida como energía de activación, y es determinante a la hora de saber si una reacción tendrá lugar, además de afectar a su cinética. Esto se debe a que esta energía de activación corresponde a la energía a superar para que una reacción pueda ocurrir, por lo que cuanto más alto sea su valor, más difícil será que inicie y más disminuirá la velocidad de reacción.

3.1.2 Técnicas computacionales

En esta subsección se detallarán las técnicas computacionales que han sido necesarias para la realización de este trabajo. Estas técnicas son la optimización de la geometría, el cálculo de frecuencias vibracionales y la termoquímica.

Optimización de la geometría

La energía de una molécula está directamente relacionada con su estabilidad: cuanto menor sea su energía, más estable es. Este es el motivo de la poca duración de los estados de transición que, como ya ha sido mencionado, poseen una alta energía. Por ello, para poder calcular el mínimo de energía de los reactivos y productos, es necesario conocer la geometría en la que son más estables, es decir, su geometría óptima.

En este trabajo, la optimización de la geometría se ha realizado con el programa Gaussian. Se ha comenzado con la creación de una geometría inicial para la molécula o moléculas en

cuestión mediante el programa Molden. Mediante Gaussian se ha resuelto la ecuación de Schrödinger, se ha calculado la energía (U) para dicha geometría y, realizando la primera derivada de U , se ha obtenido un gradiente de energía. Tras esto, el programa ha creado una nueva geometría que se encuentre más cerca del mínimo y ha repetido este proceso hasta que el gradiente de energía (∇U) obtenido sea igual a 0. Esto es indicativo de que la geometría calculada se encontraba en un máximo o un mínimo de energía.

Cálculo de la frecuencia vibracional

Tras la optimización de la geometría, era necesario confirmar si el proceso ha terminado en un máximo o un mínimo de energía. Para ello, se debe calcular la segunda derivada, definida como k o constante de fuerza. Esta constante se encuentra relacionada con las frecuencias vibracionales como se indica en la ecuación 3.10, de forma que:

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.10)$$

siendo ν la frecuencia vibracional, k la constante de fuerza y μ la masa reducida. Tras calcular el valor de k , el programa muestra las frecuencias correspondientes a la k calculada. En caso que k sea positiva, la frecuencia obtenida será también positiva, lo que indica que la geometría obtenida se encuentra en un mínimo de energía y, por tanto, será la óptima, como se muestra a continuación en la figura 3.2. Por otro lado, si k es negativa, la frecuencia no sería real debido a que se realizaría la raíz cuadrada de un número negativo. Si esto sucede, el programa muestra un valor de frecuencia negativo, lo que indica que la geometría obtenida se encuentra en un máximo de energía en relación a esa coordenada o modo de vibración.

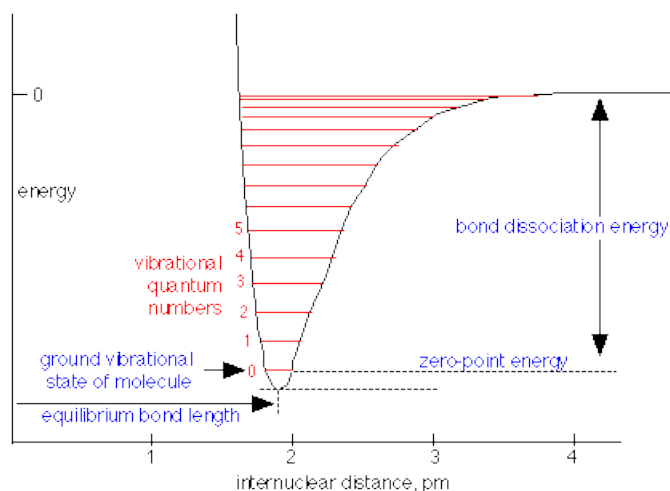


Figura 3.2: Curva de energía potencial, con sus correspondientes niveles vibracionales.

Termoquímica

Cuando se desea comparar resultados procedentes de un estudio experimental con resultados obtenidos mediante cálculos como pueden ser los procedentes del programa Gaussian, es necesario el uso de magnitudes que puedan ser obtenidas en ambos casos por igual. Al estudiar la energía de un sistema, por ejemplo, se pueden utilizar la entalpía y la energía libre de Gibbs. A continuación se explicará cómo se obtienen estas dos magnitudes mediante el programa Gaussian.

El cálculo de la frecuencia vibracional permite conocer la energía vibracional del sistema, E_{vib} , que se encuentra relacionada con la energía total. A 0 K, las moléculas no presentan movimientos rotacionales o traslacionales, por lo que la energía rotacional y traslacional será 0. Por tanto, a esta temperatura la energía total se puede definir como en la ecuación 3.11:

$$E_{tot} = E_e + E_{vib} = U \quad (3.11)$$

Sin embargo, a mayores temperaturas las energías rotacionales y traslacionales afectan a la energía total, de forma que en este caso la energía total se debe calcular mediante la ecuación 3.12:

$$E_{tot} = E_e + E_{vib} + E_{rot} + E_{tras} \quad (3.12)$$

Gaussian es capaz de calcular la energía interna en casos donde la temperatura supere los 0 K, realizando normalmente su cálculo a unos 298 K. La obtención de U permite conocer el valor de la entalpía, debido a su relación expresada en la ecuación 3.13:

$$H = U + pV \quad (3.13)$$

Al considerar que se está tratando con un mol en condiciones de fase gaseosa y de forma ideal, mediante la ecuación de los gases ideales expresada en la ecuación 3.14:

$$pV = nRT \quad (3.14)$$

se puede considerar a la entalpía como:

$$H = U + RT \quad (3.15)$$

Una vez se calcula el valor de la entalpía mediante la ecuación 3.15 se puede obtener la energía libre de Gibbs mediante la ecuación 3.16:

$$G = H - TS \quad (3.16)$$

3.1.3. Metodología específica

En esta subsección se especificará la metodología computacional utilizada a lo largo de este trabajo. Todos los cálculos computacionales se han realizado utilizando el programa Gaussian16.^[20] Se ha utilizado la Teoría del Funcional de la Densidad,^[21,22] concretamente el funcional de correlación e intercambio M06,^[23] dado que este funcional es adecuado para complejos metálicos. Para realizar la optimización de geometrías y el cálculo de frecuencias, ese funcional se ha combinado con las bases atómicas 6-31+G(d,p)^[24] para los elementos no-metálicos. Para el Iridio, en cambio, se han utilizado los pseudopotenciales relativistas de Stuttgart-Cologne ECP10MDF combinados con las funciones de base de tipo aug-cc-pVDZ-PP.^[25,26] El efecto del disolvente (Tetrahidrofurano, THF) se ha considerado mediante el modelo continuo IEFPCM.^[27]

Mediante el cálculo de frecuencias se ha establecido la naturaleza de la estructura optimizada (mínimo o estado de transición) y además se han logrado las correcciones a la energía libre de Gibbs (G^{corr}). Finalmente, el valor de la energía electrónica (E_{elec}) es refinada mediante un cálculo puntual de la energía utilizando la base atómica 6-311++G(2df,2p).^[28] De este modo, la

energía libre de Gibbs total de cada especie, a 298 K (G^{298}) puede calcularse mediante la ecuación 3.17.

$$G^{298} = E_{\text{elec}} + G^{\text{corr}} \quad (3.17)$$

Estas energías libres de Gibbs se han utilizado para calcular los perfiles de energía. Por último, el análisis de población orbital natural se ha determinado con el método *Natural Bonding Orbital* (NBO).^[29-31]

3.2. Metodología experimental

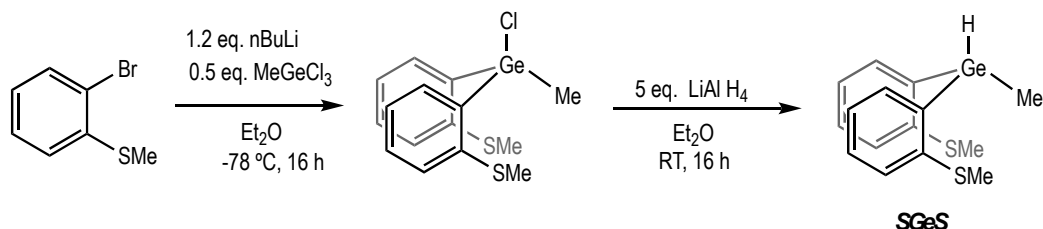
3.2.1. Condiciones generales de trabajo

Para la síntesis de los diferentes complejos se ha utilizado la técnica estándar de Schlenk en una línea de vacío/nitrógeno bajo atmósfera inerte de nitrógeno. Los disolventes con los que se ha trabajado han sido destilados y desoxigenados previamente.

Los espectros de ^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$, $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$, 2D COSY (^1H - ^1H) y 2D-HSQC ($^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ - ^1H), se han adquirido en aparatos Bruker DPX 300, BrukerAdvance DPX 400 y BrukerAdvance DPX 500. Los disolventes utilizados han sido CD_2Cl_2 , CDCl_3 y THF-d_8 . Los espectros de ^1H y $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ han sido referenciados mediante las señales residuales de los disolventes. La medida de rayos X de monocristal ha sido realizada por el Dr. Antonio Rodríguez Diéguez en la Universidad de Granada.

3.2.2. Síntesis y caracterización de compuestos

Síntesis de metilbis(2-(metiltio)fenil)germanio (SGeS).



Esquema 3.1: Síntesis de SGeS.

En primer lugar se introduce 2-bromotioanisol (200 mg, 133.33 μL , 0.98 mmol) en un matraz Schlenk bajo atmósfera inerte y se disuelve en 5 mL de dietiléter. Después, se pone la disolución en un baño de acetona- N_2 líquido ($-78\text{ }^\circ\text{C}$) y se añade nBuLi (737.5 mL, 1.18 mmol) y se deja en agitación constante durante una hora. Tras esto, se añade triclorometilgermanio (95.07 mg, 55.73 μL , 0.49 mmol) y se deja la reacción con agitación durante 16 horas. Una vez haya finalizado la reacción, se realiza una extracción $\text{Et}_2\text{O}/\text{H}_2\text{O}$, añadiendo sulfato de magnesio a la fase orgánica obtenida para eliminar totalmente el agua de ella. Se filtra la disolución y se evapora el disolvente. A continuación, bajo atmósfera inerte, se añade hidruro de litio y aluminio (115.75 mg, 3.05 mmol) y se disuelve en 5 mL de dietiléter. Se deja la reacción en agitación durante 16 horas. Una vez haya finalizado la reacción, filtrar la disolución con celita y llevar a sequedad del producto.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 7.5-7.0 (8 H, H aromáticos), 5.5 (q, $J=3.5$ Hz, 1 H, Ge-H), 2.4 (s, 6 H, S- CH_3), 0.8 (d, 3 H, $J=3.5$ Hz, Ge- CH_3).

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 136-126 (6 C aromáticos), 19(2 C, S CH_3), -4 (s, Ge- CH_3).

Síntesis de 1-SGeS.

Esquema 3.2: Síntesis de 1-SGeS.

En primer lugar, se introduce en un Schlenk **SGeS** (85 mg, 0.254 mmol). A continuación, se añade trifenilfosfina (82.87 mg, 0.254 mmol) y dímero de cloruro de iridio ciclooctadieno (85.26 mg, 0.127 mmol). Se disuelve bajo atmósfera inerte en 5 mL de dietiléter y se deja la reacción durante una hora. Tras finalizar la reacción, se elimina el disolvente a vacío, se lava el sólido obtenido con pentano y se elimina el pentano a vacío.

Tras eliminar el pentano del producto se obtuvo el complejo **1-SGeS** con un rendimiento del 30.52%.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 7.7-7.0 (23 H aromáticos), 3.4 (s, 3 H, S- CH_3), 2.6 (s, 3 H, S- CH_3), 0.1 (s, 3 H, Ge- CH_3), -15.3 (d, $J = 18\text{Hz}$, 1 H, H-Ir).

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (300 MHz, CD_2Cl_2): δ 11.5 (s, PPh_3).

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 136-126 (30 C aromáticos), 33 (S CH_3), 21 (S CH_3), -2 (s, Ge- CH_3).

Síntesis de 2-SGeS.

Esquema 3.3: Síntesis de 2-SGeS.

En primer lugar, se introduce **1-SGeS** (30 mg, 0.034 mmol) y $\text{NaBAR}_4^{\text{F}}$ (29.9 mg, 0.034 mmol) en un Schlenk. Se disuelve en diclorometano en atmósfera inerte, se añade una pequeña cantidad de THF y se deja la reacción durante 30 minutos. Tras esto, se filtra el contenido del Schlenk y se elimina el disolvente a vacío. Se lava el producto obtenido con 2 mL de pentano.

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3): δ 7.9-6.9 (35H aromáticos), 3.7 (m, 4H, THF), 3.3 (s, 3H, S CH_3), 2.6 (s, 3H, S CH_3), 1.9 (m, 4H, THF), 0.1 (s, 3H, Ge- CH_3), -15.3 (d, $J = 15\text{ Hz}$, 1H, H-Ir).

3.2.3. Catálisis

El seguimiento de las reacciones catalíticas se ha llevado a cabo en un reactor conectado a un detector que mide la variación de presión (Man-on-the-Moon).

Hidrólisis de Me_2PhSiH catalizada por **2-SGeS**.

Esquema 3.4: Hidrólisis de fenildimetilsilano.

En primer lugar, se introduce en un Schlenk **2-SGeS** (2.53 mg, 0.0025 mmol) y se disuelve bajo atmósfera inerte con 1 mL de THF. A continuación, se introduce agua destilada en el Schlenk (45 μL , 2.5 mmol). Se toma el contenido del Schlenk y se traslada al equipo Man-on-the-Moon bajo atmósfera inerte. Tras esto, se introduce en el mismo equipo fenildimetilsilano (38.30 μL , 0.25 mmol) y se deja la reacción hasta que la presión medida sea constante.

Hidrólisis de Me_2PhSiD catalizada por **2-SGeS**.

Esquema 3.5: Hidrólisis de fenildimetilsilano deuterado.

El procedimiento es similar al indicado para el fenildimetilsilano sin deuterar: se introduce en un Schlenk **2-SGeS** (2.53 mg, 0.0025 mmol) y se disuelve bajo atmósfera inerte con 1 mL de THF. A continuación, se introduce agua destilada en el Schlenk (45 μL , 2.5 mmol). Se toma el contenido del Schlenk y se traslada al equipo Man-on-the-Moon bajo atmósfera inerte. Tras esto, se introduce en el mismo equipo fenildimetilsilano deuterado (38.58 μL , 0.25 mmol) y se deja la reacción hasta que la presión medida sea constante.

Hidrólisis de Ph_3SiH catalizada por **2-SGeS**.

Esquema 3.6: Hidrólisis de trifenilsilano.

En primer lugar se introducen en un Schlenk **2-SGeS** (2.53 mg, 0.0025 mmol) y trifenilsilano (65.11 mg, 0.25 mmol). Se disuelven bajo atmósfera inerte con 1 mL de THF y se traslada la

disolución al Man-on-the-Moon. Se añade agua destilada (45 μL , 2.5 mmol) al mismo equipo y se deja la reacción hasta que la presión medida sea constante.

Hidrólisis de Ph_3SiD catalizada por **2-SGeS**.

Esquema 3.7: Hidrólisis de trifenilsilano deuterado.

El procedimiento es similar al indicado para el trifenilsilano sin deuterar: se introducen en un Schlenk **2-SGeS** (2.53 mg, 0.0025 mmol) y trifenilsilano deuterado (65.36 mg, 0.25 mmol). Se disuelven bajo atmósfera inerte con 1 mL de THF y se traslada la disolución al Man-on-the-Moon. Se añade agua destilada (45 μL , 2.5 mmol) al mismo equipo y se deja la reacción hasta que la presión medida sea constante.

4. Resultados y discusión

4.1 Resultados experimentales

Como se ha comentado tanto en la introducción como en los objetivos de este trabajo de fin de grado, se deben sintetizar catalizadores isoestructurales a **2-SSiS** donde el átomo de silicio central del ligando será cambiado por un germanio o un carbono con el fin de modificar las propiedades tanto electrónicas como estructurales y así estudiar como estas variaciones influyen tanto en la reacción de hidrólisis de silanos como en la posibilidad de que el efecto túnel tenga lugar. Hay que comentar que el ligando **SCS** no ha podido ser sintetizado, por lo que su estudio será únicamente teórico. En esta subsección se detallarán los resultados obtenidos tras las reacciones llevadas a cabo en el laboratorio. Estas reacciones son la síntesis del catalizador **2-SGeS** y las hidrólisis de Me_2PhSiH , Ph_3SiH , Me_2PhSiD , Ph_3SiD . Además, se compararán los resultados con las hidrólisis realizadas con catalizador de Ir-Si (**2-SSiS**).

4.1.1 Síntesis del ligando y complejos

La síntesis del ligando **SGeS** se realiza a través de tres reacciones (esquema 4.1). En primer lugar se lleva a cabo la litiación del 2-bromotioanisol con n-butil-litio, lo que permite invertir la polaridad del compuesto. A continuación se reacciona con triclorometilgermanio, en el que se sustituyen dos de los cloruros que lo componen por tioanisoles. Por último, una reducción utilizando LiAlH_4 permite obtener como producto el ligando **SGeS**, necesario para sintetizar el catalizador utilizado. El procedimiento para realizar estas reacciones ha sido explicado previamente en el apartado 3.2.2.

Esquema 4.1: Síntesis del proligando SGeS.

La obtención del ligando **SGeS** ha sido comprobada mediante RMN de ^1H y $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ (figuras 4.1 y 4.2). En el espectro de ^1H RMN se pueden observar varias señales entre 7.5 y 7 ppm pertenecientes a los hidrógenos de los dos anillos aromáticos del producto, además de otra señal a 2.4 ppm que integra por 6 hidrógenos y que corresponde a los dos metilos unidos a los dos azufres, los cuales son simétricos. Por último, y como más relevante, se observa un doblete a 0.8 ppm y un cuadruplete a 5.4 ppm correspondientes al hidrógeno enlazado al germanio (Ge-H) y al metilo unido al germanio (Ge-CH₃), los cuales se acoplan entre sí.

En el espectro de $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ se observan las señales correspondientes a los carbonos aromáticos entre 150 y 120 ppm. Además, también se observa una señal a 19 ppm que ha sido asignada a los metilos enlazados a los azufres y otra señal a -4 ppm correspondiente al metilo unido al germanio. Estas señales han sido asignadas gracias al espectro bidimensional ^1H - ^{13}C HSQC que correlaciona protones y carbonos (ver Anexos).

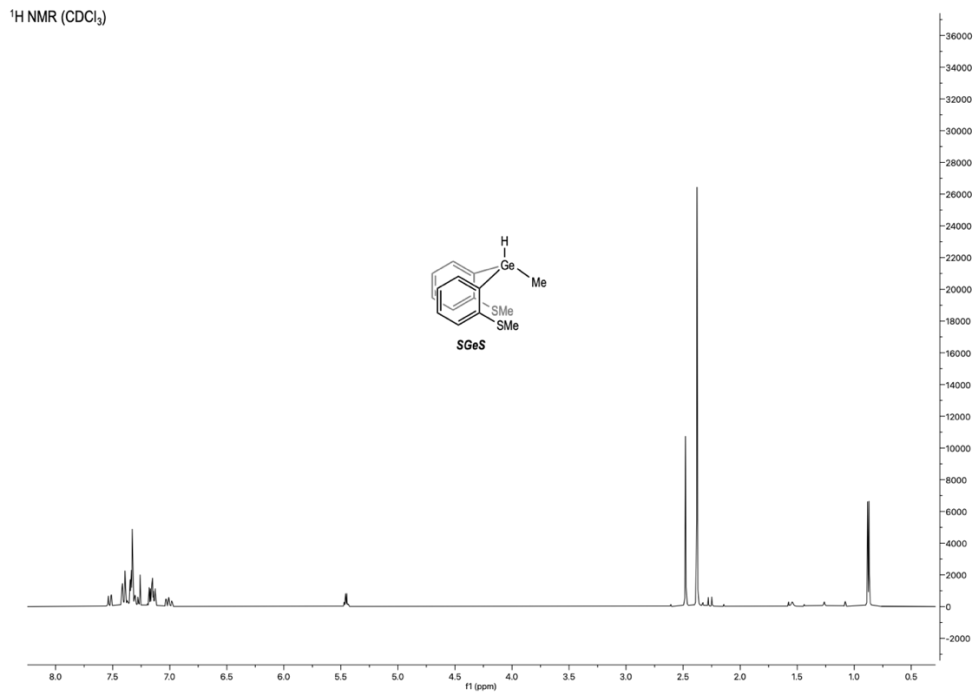


Figura 4.1: $^1\text{H RMN de SGeS}$.

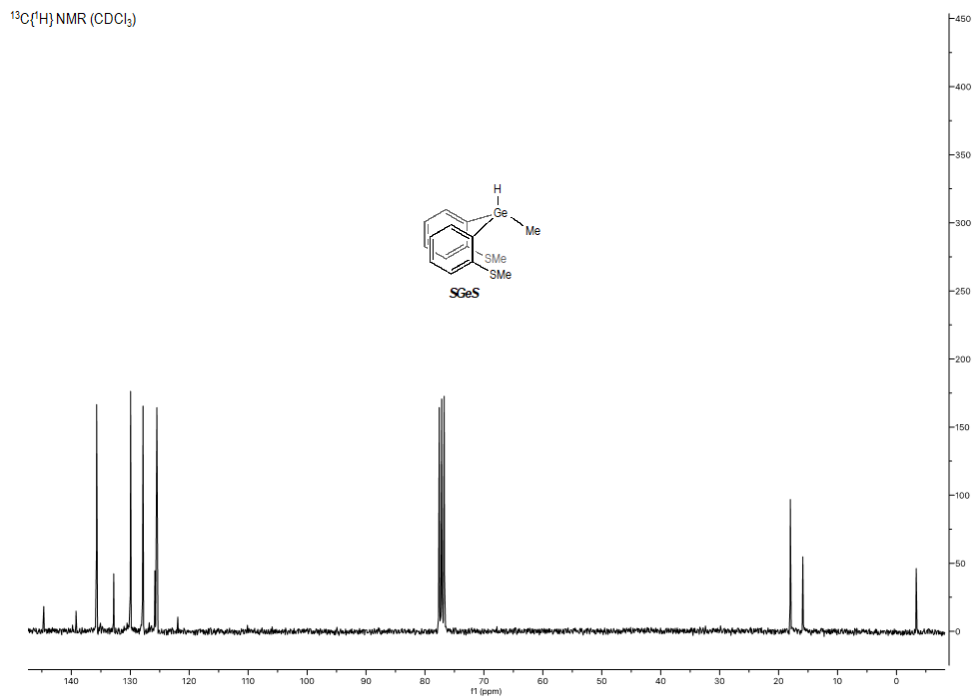


Figura 4.2: $^{13}\text{C RMN de SGeS}$.

Una vez sintetizado y caracterizado el proligando **SGeS** se pasó a sintetizar los complejos neutro y catiónico de iridio. La obtención de **1-SGeS** se realiza a partir de una adición oxidativa del ligando **SGeS** al compuesto $[\text{Ir}(\text{coe})\text{Cl}]_2$, en la que se produce la oxidación del iridio, de Ir^+ a Ir^{3+} , y la ruptura del enlace Ge-H del ligando además de la pérdida de ciclooctadieno.

Esquema 4.2: Síntesis del complejo 1-SGeS.

La realización de RMN ^1H , ^{13}C y ^{31}P (figuras 4.3-4.5) permiten comprobar que el producto obtenido es el deseado. La aparición de una señal a 11.5 ppm en el ^{31}P RMN demuestra que el compuesto organometálico consta de una molécula de trifenilfosfina como ligando. En ^1H RMN destaca la aparición de un doblete a -15.3 ppm que no se encuentra presente en el RMN del ligando **SGeS**. Esta señal corresponde al hidruro inorgánico enlazado al iridio, siendo el motivo de que sea un doblete su acoplamiento con el fósforo de la trifenilfosfina, también, debido a la constante de acoplamiento ($\text{JP-H} = 18\text{Hz}$) se puede decir que el hidruro y la fosfina se encuentran en posición *cis* respectivamente. En el ^{13}C RMN se puede observar que, a diferencia del RMN realizado al ligando, los tiometilos (S-CH_3) aparecen en dos señales distintas, uno a 33 ppm y otro a 21 ppm. Esto se debe a que en el compuesto **1-SGeS**, estos tiometilos ya no son simétricos.

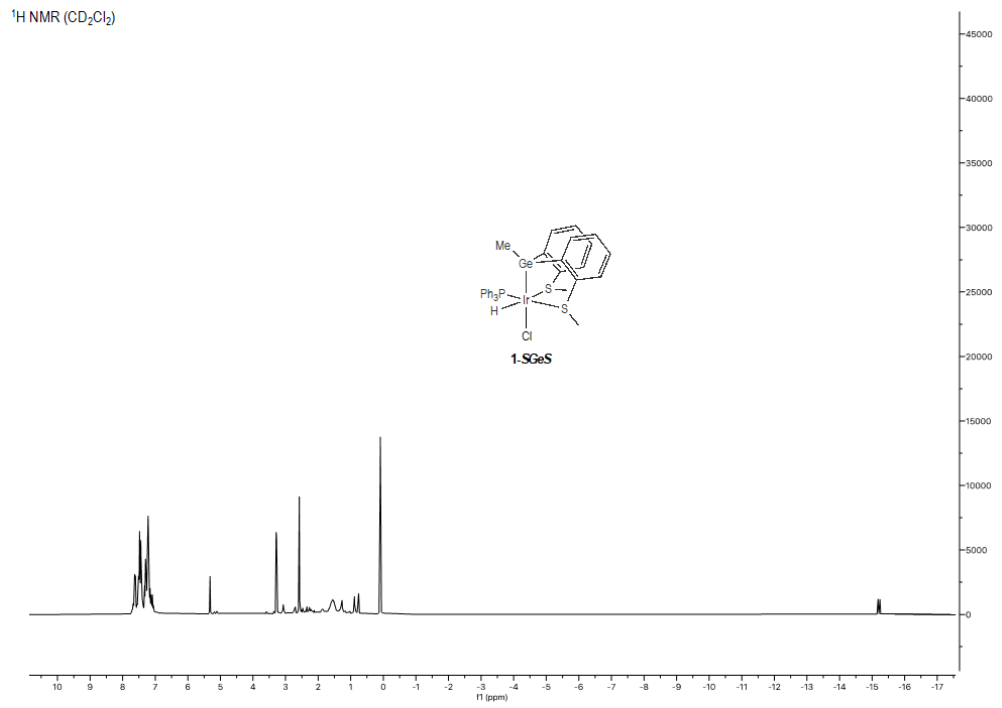


Figura 4.3: ^1H RMN de **1-SGeS**.

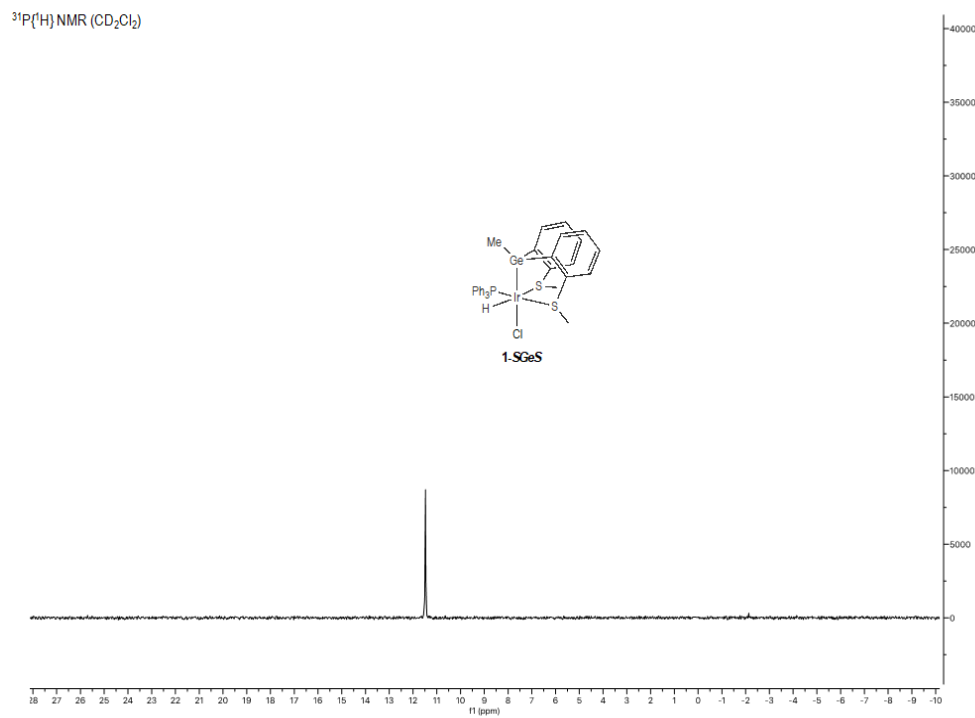


Figura 4.4: ^{31}P RMN de **1-SGeS**.

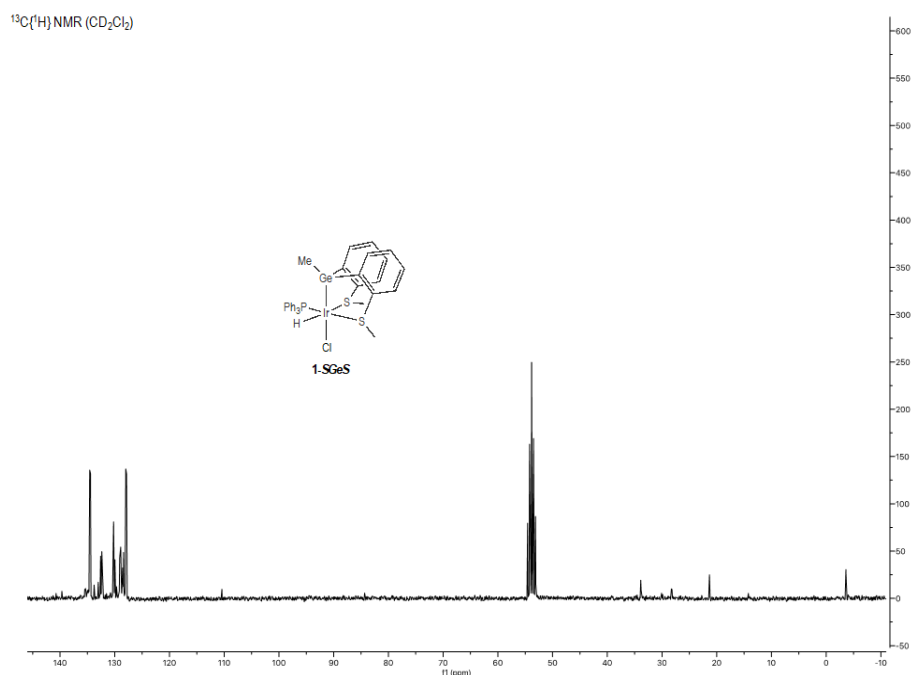


Figura 4.5: ^{13}C RMN de **1-SGeS**.

El compuesto **1-SGeS** pudo ser caracterizado en estado sólido mediante difracción de rayos X. En la figura 4.6 se muestra una representación gráfica de dicho compuesto. En ella se aprecia que la situación de los ligandos es la propuesta mediante los datos espectroscópicos en disolución. Como dato a destacar es la distancia Ir-Cl, la cual es ligeramente menor (2.503(1) Å) a la distancia Ir-Cl en el complejo análogo **1** (2.533(1) Å). Esto evidencia la menor influencia *trans* del átomo de germanio con respecto al silicio.

Una vez obtenido el complejo neutro de iridio(III) **1-SGeS** se pasa a sintetizar el compuesto catiónico de iridio(III) **2-SGeS**, que se utilizará durante las hidrólisis de los silanos como precatalizador. La síntesis del mismo se realiza mediante la reacción entre **1-SGeS** y $\text{NaBAR}_4^{\text{F}}$, donde se sustituye el cloruro, un ligando aniónico, por una molécula de THF, un ligando neutro, por lo que el compuesto final es una sal con un catión, el complejo de iridio y un anión que será el borato.

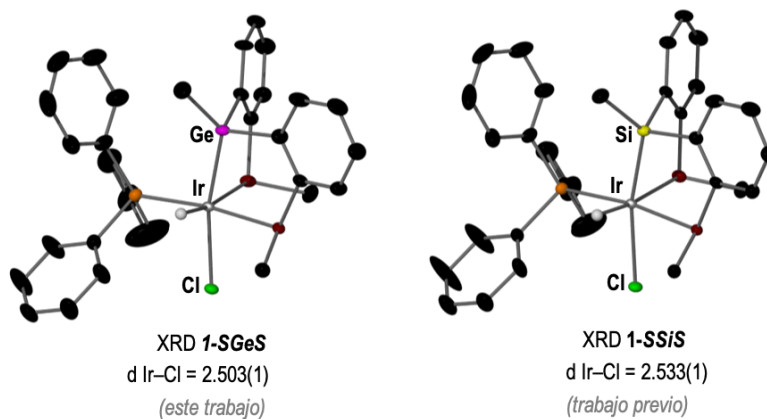


Figura 4.6: Estructura de rayos X de **1-SGeS** y la comparación con su análoga **1-SSiS**.

Esquema 4.3: Síntesis del precatalizador **2-SGeS**.

El ^1H RMN (figura 4.7) realizado para la comprobación del producto obtenido muestra que posee señales análogas a las observadas para **1-SGeS**, a diferencia de unas nuevas señales a 3.7 ppm y 1.9 ppm, procedentes del THF incorporado al compuesto y las correspondientes al contraanión $[\text{BAR}_4^{\text{F}}]^-$.

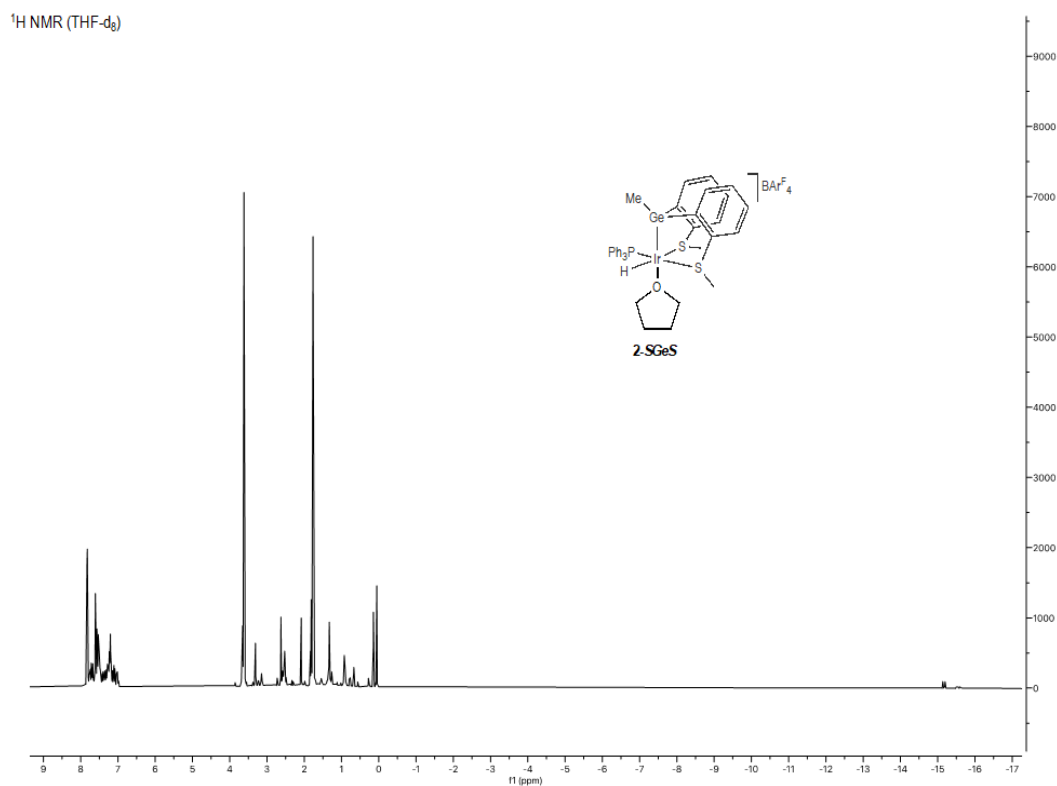


Figura 4.7: ¹H NMR de 2-SGeS.

4.1.2 Hidrólisis de Me₂PhSi-H(D) y Ph₃Si-H(D) catalizadas por 2-SGeS

Una vez obtenido el complejo análogo al usado como catalizador en hidrólisis de silanos anteriormente en el grupo, se pasó a probar nuestro nuevo complejo como catalizador en la hidrólisis de algunos silanos. Hay que señalar, que este complejo ya ha sido probado como catalizador en la hidrólisis de trietilsilano con buenos resultados. Por este motivo, en este trabajo, solo hemos tenido que realizar la hidrólisis de Me₂PhSi-H y Ph₃Si-H y sus derivados deuterados. Para ello se ha utilizado un matraz cerrado conectado a un transductor de presión (Man-on-the-Moon) que permite seguir la reacción a tiempo real mediante la medición de la presión del gas generado. Los resultados obtenidos, los cuales se muestran en la Figura 4.8, nos hacen suponer que esta reacción sigue una cinética de pseudo-primer orden.

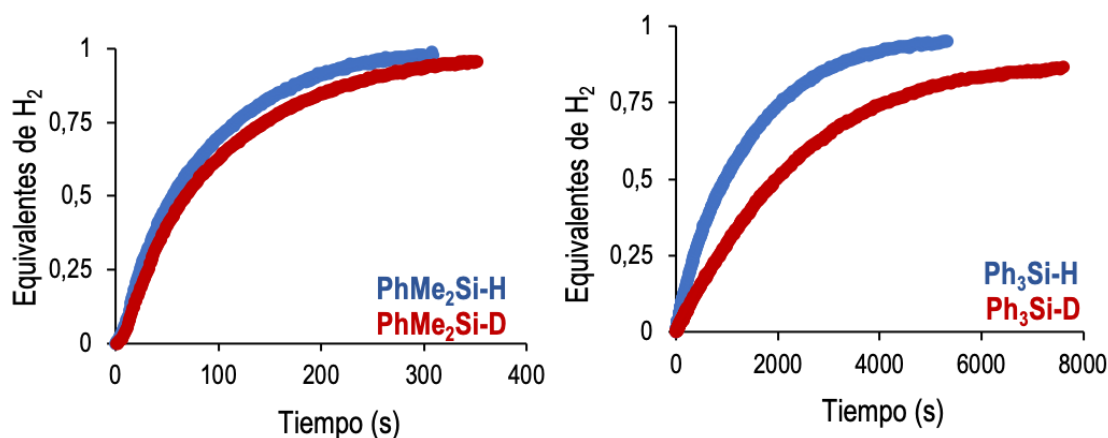


Figura 4.8: Perfil de las reacciones (eq. Hidrógeno vs tiempo) de hidrólisis de $\text{Me}_2\text{PhSi-H(D)}$ (izquierda) y $\text{Ph}_3\text{Si-H(D)}$ (derecha) catalizadas por **2-SGeS**.

Para poder determinar la constante de velocidad, debe llegarse a la ecuación simplificada. Lo primero, es describir la ecuación de velocidad, pues ésta depende de la constante de velocidad, la concentración de los sustratos y la concentración de catalizador. Hay que tener en cuenta que en estudios previos del grupo se ha determinado que esta reacción es de orden cero con respecto al agua:

$$v = k[\text{catalizador}][\text{silano}]$$

Debido a la dificultad que supone el tratamiento de esta ecuación de segundo orden para la obtención de la constante de velocidad, al mantenerse constante a lo largo de toda la reacción la concentración del catalizador y el agua, ya que va en un gran exceso, puede simplificarse la misma obteniéndose:

$$v = k_{obs}[\text{sustrato}]$$

Donde $k_{obs}=k[\text{catalizador}]$. A su vez, ésta puede ser dada de forma diferencial:

$$v = - \frac{d[\text{sustrato}]}{dt} = k_{obs}[\text{sustrato}]$$

Cuyo signo negativo se debe a la desaparición de los reactivos. La cual, puede ser considerada por ello como una cinética de pseudo-primer orden. Mediante desarrollos teóricos, puede obtenerse la ecuación para la velocidad de la reacción de forma simplificada:

$$V = -\frac{d[A]}{dt} = k_{obs} [A]$$

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_{obs} [A]$$

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k_{obs} dt$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = \int_{t_0}^t -k_{obs} dt$$

$$\ln[A] - \ln[A_0] = -k_{obs} t$$

$$\ln \frac{[A]}{[A_0]} = -k_{obs} t$$

Esquema 4.4: Desarrollo de ecuaciones para la obtención de la constante cinética a partir de la ecuación de velocidad de primer orden.

Donde [A] es la concentración del silano a un tiempo cualquiera, [A]₀ es la concentración de silano inicial y t es el tiempo. En nuestro caso debemos tener en cuenta que lo que estamos midiendo es la presión de hidrógeno la cual podemos transformar en equivalentes de hidrógeno formados. Sabiendo esto podemos decir que (eq. A) = (1 - eq. H₂) y que eq. A₀ = 1). Así, si representamos ln[1 - eq. H₂] frente al tiempo (figura 4.9), se puede obtener la constante cinética observada mediante el valor de la pendiente de la recta obtenida (Tabla 4.1).

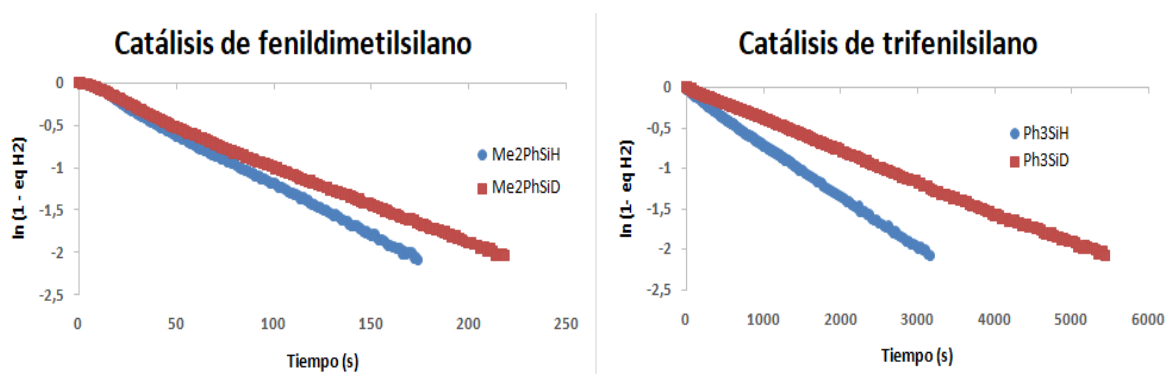


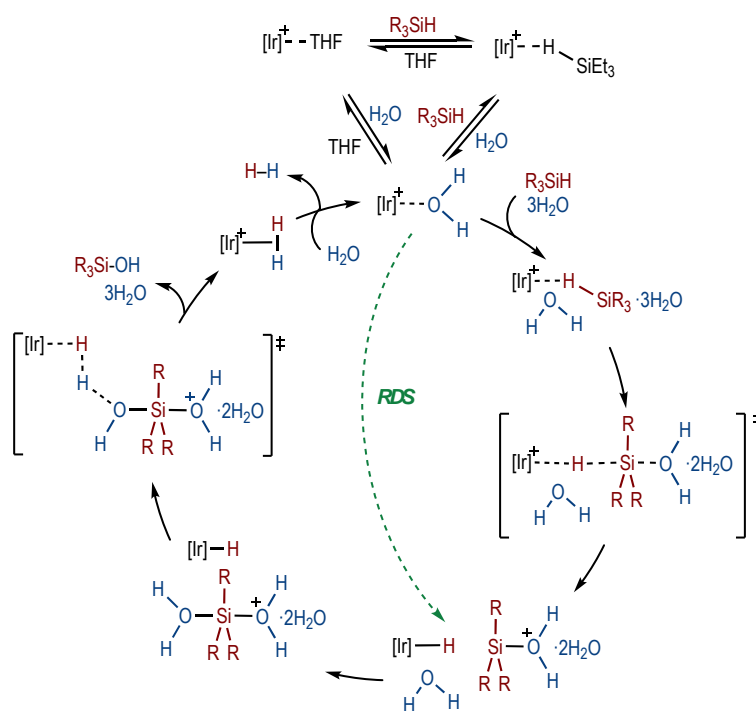
Figura 4.9: Representación gráfica de ln[1 - eq. H₂] vs tiempo de las catálisis de fenildimetilsilano y trifenilsilano.

Conociendo las constantes de velocidad, se puede obtener los efectos isotópicos cinéticos o KIEs (*Kinetic Isotopic Effect* por sus siglas en inglés) correspondientes a cada silano. El KIE es el resultado de un cociente entre las constantes de velocidad de dos isótopos.^[1]

	k_H ($s^{-1} M^{-1}$)	k_D ($s^{-1} M^{-1}$)	KIE
Me ₂ PhSi-H(D)	4.78	3.74	1.28
Ph ₃ Si-H(D)	0.26	0.15	1.71

Tabla 4.1: Constantes de velocidad y KIEs obtenidas para las hidrólisis de fenildimetilsilano y trifenilsilano con catalizador **2-SGeS**.

Un valor de KIE mayor que 1, nos dice que el enlace Si-H participa en el paso lento de la reacción, como ocurría para el catalizador análogo **2-SSiS**. En nuestro caso, valores de 1.28 y 1.71 nos confirman, si consideramos el mismo ciclo catalítico que para **2-SSiS** (figura 4.5), que el paso lento de la reacción sería la transferencia del átomo de hidrógeno del silicio al iridio. Los valores bajos de KIE encontrados nos dicen que en la hidrólisis de estos silanos catalizada por **2-SGeS** no hay participación de túnel cuántico en el paso lento de reacción.



Esquema 4.5: Ciclo catalítico propuesto en base a los resultados previos del grupo.

El ciclo catalítico para esta reacción se ha propuesto en base a los resultados previos del grupo. Nuestro precatalizador, que tiene un THF coordinado estaría en equilibrio con el complejo que tiene un silano coordinado mediante un enlace sigma, y el complejo que tiene una molécula de agua coordinada, que es el que está dentro del ciclo catalítico. Este, reaccionaría con un silano, desplazando el agua y mediante un ataque de otra molécula de agua a dicho silano daría lugar a la formación de un complejo Ir-H y un catión sililo. Estos dos reaccionarían entre sí para dar lugar a la formación de hidrógeno y de una molécula del silanol correspondiente.

4.1.3 Comparación de los datos cinéticos con los obtenidos previamente en el grupo.

Para intentar averiguar algún factor que determine que haya efecto túnel o no en esta reacción, se compararon las constantes de velocidad y los KIEs obtenidos para las reacciones con catalizador de **2-SGeS** con los procedentes de reacciones con catalizador de **2-SSiS** (Figura 4.10 y tabla 4.2).

Fijándonos en los KIEs, se puede decir que para el catalizador **2-SSiS** existe participación de túnel cuántico cuando se realiza la hidrólisis de trietilsilano y trifenilsilano, los más voluminosos y electrónicamente, los más diferentes. Usando este mismo catalizador no se observa participación de túnel cuántico en la hidrólisis de fenildimetilsilano. Para el catalizador **2-SGeS** no se observa túnel en ninguna de las reacciones de hidrólisis estudiadas.

Si comparamos las constantes de velocidad obtenidas con los dos catalizadores utilizando el mismo silano, podemos decir que, en el caso de la hidrólisis de trietilsilano, la k_H observada para **2-SSiS** ($34.98 \text{ s}^{-1} \text{ M}^{-1}$) es mucho mayor que la obtenida cuando se usa **2-SGeS** ($0.65 \text{ s}^{-1} \text{ M}^{-1}$). Por el contrario las constantes de velocidad obtenidas para la reacción de hidrólisis del $\text{Et}_3\text{Si-D}$ son muy parecidas (**2-SSiS**, $k_D = 0.10 \text{ s}^{-1} \text{ M}^{-1}$; **2-SGeS**, $k_D = 0.15 \text{ s}^{-1} \text{ M}^{-1}$). Si asumimos que con el silano deuterado la reacción va íntegramente por el camino clásico y que las constantes de velocidad son similares, la diferencia de actividades observadas en el caso del $\text{Et}_3\text{Si-H}$ tiene que venir dada íntegramente por la participación del efecto túnel. El caso del trifenilsilano es similar. Las constantes de velocidad de hidrólisis de $\text{Ph}_3\text{Si-D}$ son similares mientras las respectivas al $\text{Ph}_3\text{Si-H}$ difieren bastante. Esto también sería indicativo de la presencia de un efecto túnel en esta reacción. Por último, en el caso del fenildimetilsilano, la cosa es un poco diferente. Ambas constantes de velocidad son mucho más altas cuando se usa como catalizador **2-SSiS**. Esto se podría deber a dos cosas: a) el complejo **2-SSiS** es más activo que **2-**

SGeS, es decir la energía de activación (camino clásico) a sobrepasar es mucho más baja cuando se usa este complejo. b) Cuando se usa **2-SSiS** como catalizador, hay efecto túnel tanto de hidrógeno como de deuterio.

Con la información que tenemos hasta ahora no nos podemos decantar por ninguna de las dos.

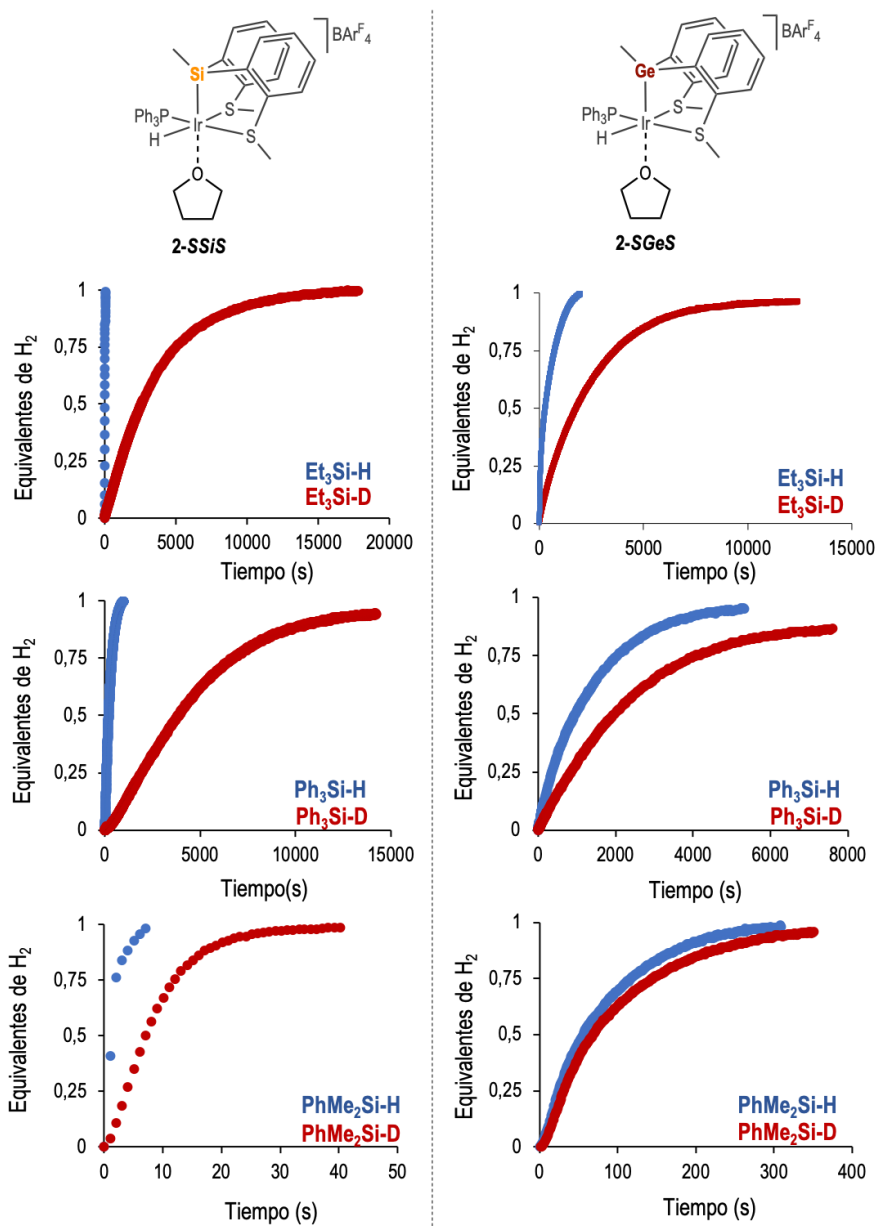


Figura 4.10: Perfil de las reacciones (eq. Hidrógeno formados vs tiempo) de hidrólisis de $Et_3Si-H(D)$, $Ph_3Si-H(D)$ y $Me_2PhSi-H(D)$ catalizadas por **2-SSiS** (izquierda) y **2-SGeS** (derecha).



	2-SSiS			2-SGeS		
	k_H ($s^{-1} M^{-1}$)	k_D ($s^{-1} M^{-1}$)	KIE	k_H ($s^{-1} M^{-1}$)	k_D ($s^{-1} M^{-1}$)	KIE
Et ₃ SiH(D)	34.98	0.10	346	0.65	0.15	4
Ph ₃ SiH(D)	1.58	0.094	17	0.26	0.15	1.71
Me ₂ PhSiH(D)	219.2	50.6	4	4.78	3.74	1.28

Tabla 4.2: Comparativa entre las constantes cinéticas y KIEs de las reacciones con distintos silanos y catalizadores de 2-SSiS o 2-SGeS.

4.2 Resultados computacionales

En esta sección se expondrán los resultados computacionales obtenidos para el RDS descrito anteriormente, en función de diversos catalizadores y silanos (ver Figura 4.11), de cara a predecir la importancia del efecto túnel en cada caso. Concretamente, nos centraremos en los perfiles de energía libre de Gibbs, geometrías, cargas parciales y volúmenes molares de cara a estudiar los efectos electrónicos y estéricos que gobiernan la reacción y el impacto del efecto túnel en ellas. En la Figura 4.11 se muestran todas las estructuras (intermedios y estados de transición) calculadas en este trabajo.

El cálculo de los perfiles de reacción de la Etapa Limitante (ΔG^{int} y ΔG^{TS}) permite determinar varios factores. ΔG^{int} indica la termodinámica de ir de C_0 a C_1 : cuanto menor sea su valor, más estables serán los intermedios respecto de los reactivos, lo que favorece que tenga lugar la reacción. ΔG^{TS} corresponde a la barrera de potencial que debe ser superado, o atravesado en caso de que ocurra efecto túnel, para que suceda la reacción. Por tanto, cuanto menor sea el valor de ΔG^{TS} , más fácil será de atravesar y más rápido tendrá lugar la reacción de acuerdo al mecanismo clásico de Arrhenius. Por otro lado, para facilitar el efecto túnel, además de la altura de barrera también hay que tener en cuenta su anchura. A menor altura y anchura de la barrera, la facilidad para que ocurra efecto túnel aumenta. Como ejemplo, las estructuras en 3D correspondientes a $C_0_2SCS_Me_2Ph$, $TS_2SCS_Me_2Ph$, $C_1_2SCS_Me_2Ph$ se muestran en la figura 4.12.

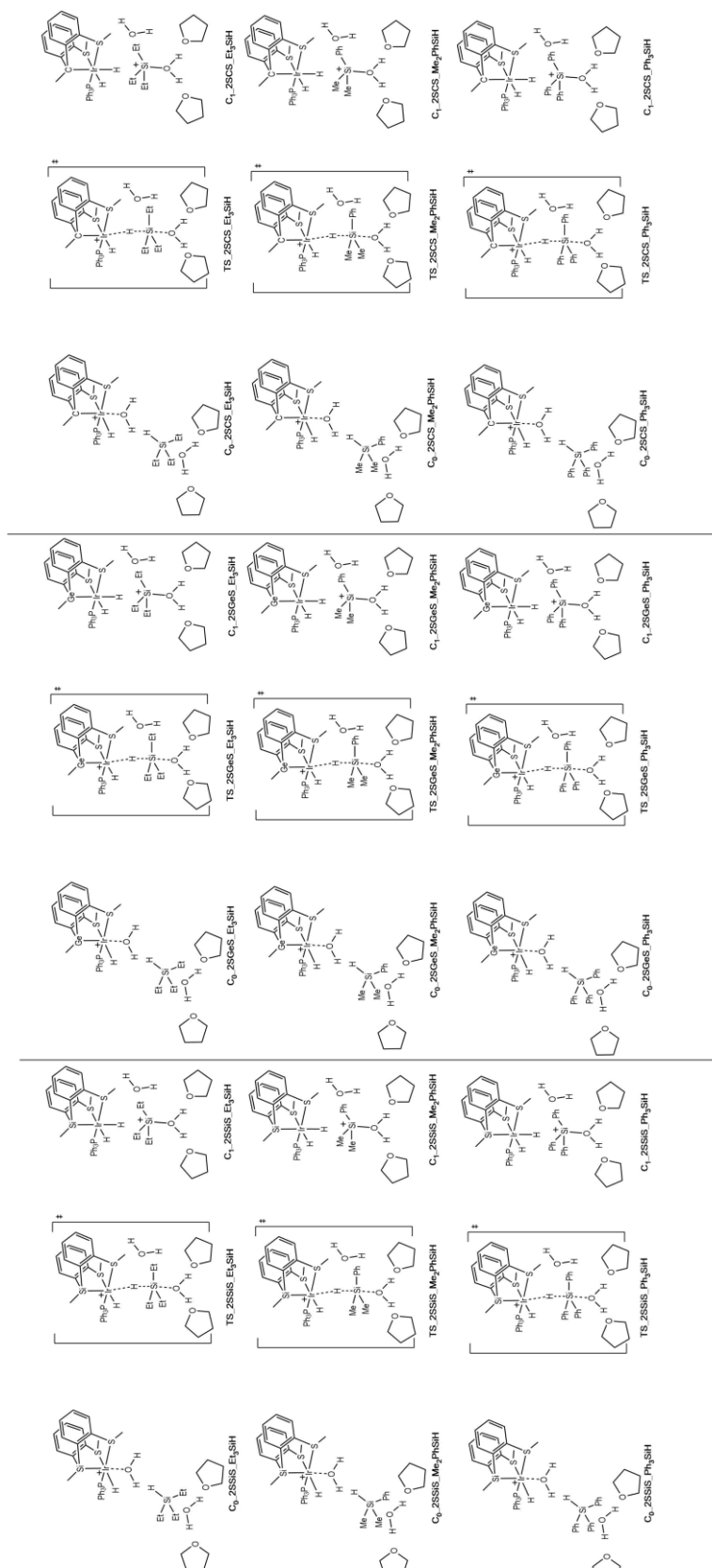


Figura 4.11: Estructuras de C_0 , TS y C_1 con Et_3SiH , Me_2PhSiH y Ph_3SiH en presencia de $2-SSiS$, $2-SGeS$ y $2-SCS$.

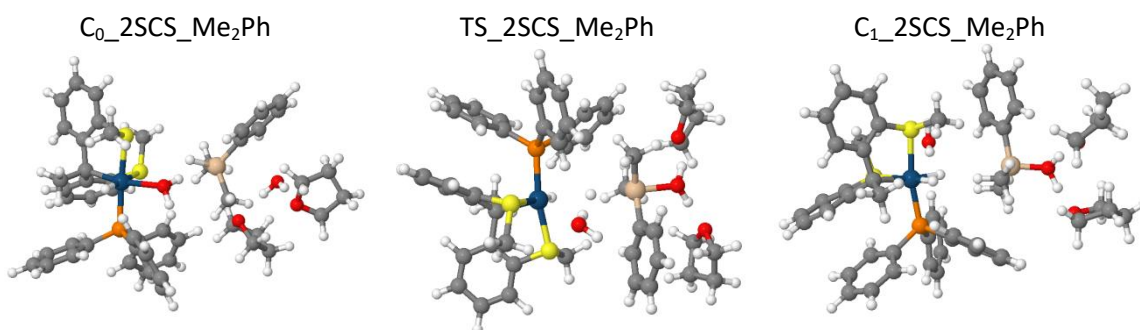


Figura 4.12: Geometría en C₀, TS y C₁ de fenildimetilsilano con catalizador 2-SCS.

En la Figura 4.13 pueden observarse los perfiles de reacción correspondientes a la Etapa Limitante de la transferencia de H/D para las nueve combinaciones de catalizadores y silanos estudiados. Debemos resaltar que los estados de transición no han podido ser optimizados totalmente, y es por ello que se han utilizado como referencia las distancias Ir-H, Ir-Si y H-Si logradas para Ir-Si y Et₃SiH. Comparando los perfiles de los diferentes silanos podemos observar que con todos los catalizadores el perfil correspondiente al Ph₃SiH queda por encima, con una barrera más alta y una estabilización de C₁ menor que en los casos de Et₃SiH y Me₂PhSiH estudiados.

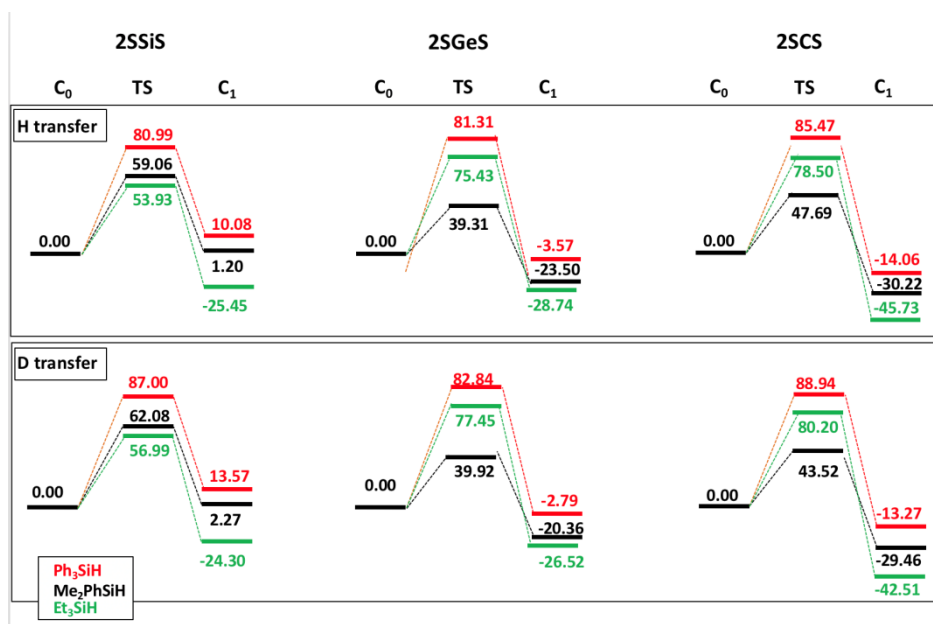


Figura 4.13: Perfiles de reacción para Me₂PhSiH (negro), Ph₃SiH (rojo) y Et₃SiH (verde) con distintos catalizadores (de izquierda a derecha 2-SSiS, 2-SGeS y 2-SCS respectivamente) y sus correspondientes energías libres de Gibbs (ΔG^{int} y ΔG^{TS}) en kJ/mol.

Para intentar comprender las causas de esta mayor barrera energética se han estudiado los silanos por separado, para elucidar si el efecto es estérico o electrónico. Así, se ha estudiado el enlace H-Si por medio del método de orbitales naturales de enlace (NBO por sus siglas en inglés), y se ha calculado el volumen molar (V_m) de cada silano. Los resultados están recogidos en la Tabla 4.3. Como puede observarse, el carácter hidruro del hidrógeno es mayor en cadenas alifáticas que en las aromáticas, debido al efecto donador de los grupos Et y Me. Nótese que estas cargas del H están de acuerdo con la observación experimental del desplazamiento químico en los espectros de ^1H RMN mostrados anteriormente. Así, el enlace Si-H está más polarizado en estos casos que en el caso de Ph_3SiH , lo que estabiliza más el enlace Si-H. Esta conclusión viene corroborada por los órdenes de enlace calculados, siendo en enlace Si-H más fuerte en el caso del Et_3SiH y más débil en el Ph_3SiH . Podría parecer pues que siendo esto así sería más fácil la transferencia de H para el Ph_3SiH , pero no debemos olvidar que para que ocurra una transferencia debe haber un ataque nucleófilo. Este ataque nucleófilo ocurrirá más fácilmente si ocurre en un electrófilo mayor. Fijándonos en las cargas del Si, queda claro que la mayor carga en los casos de Et_3SiH y Me_2PhSiH facilitan dicho ataque. Desde el punto de vista estérico, los volúmenes molares de los silanos nos muestran claramente que el tamaño del Ph_3SiH es sustancialmente mayor que el de los otros dos silanos. Et_3SiH y Me_2PhSiH , sin embargo, ocupan un volumen similar, pero distribuido de manera diferente debido a los tamaños de los grupos funcionales Et, Me y Ph (figura 4.14). Teniendo en cuenta, por lo tanto, los efectos estéricos y electrónicos se puede explicar que las barreras sean más altas para el Ph_3SiH . Los efectos estéricos, además, son evidentes en las distancias en C_1 entre el Ir del catalizador y el Si del silano. La distancia Ir-Si es de 5.01 Å, 4.91 Å y 5.49 Å para Et_3SiH , Me_2PhSiH y Ph_3SiH , respectivamente. La inversión del silano con grupos funcionales tan voluminosos hace que la repulsión estérica penalice este paso.

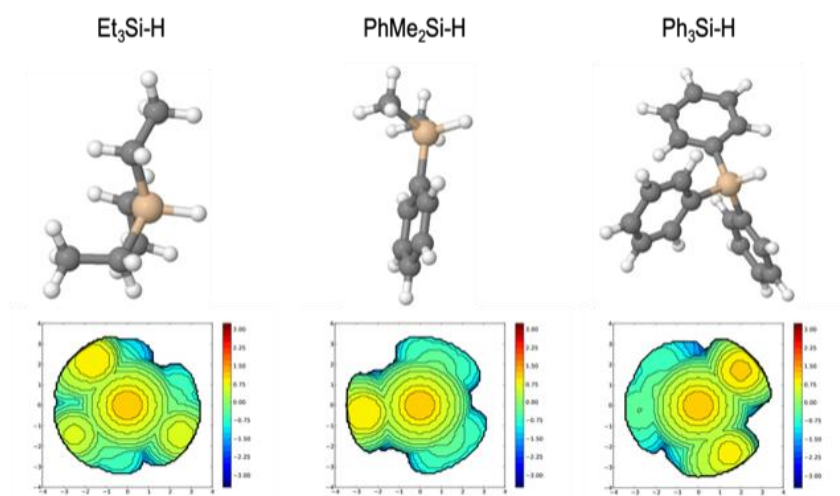


Figura 4.14: Geometría de los diferentes silanos aislados (de izquierda a derecha trietilsilano, fenildimetilsilano y trifenilsilano respectivamente) y sus correspondientes distribuciones de carga.

	Et₃SiH	Me₂PhSiH	Ph₃SiH
Q (H^{δ-})	-0.147	-0.141	-0.127
Q (Si^{δ+})	0.589	0.662	0.365
Orden de enlace	0.973	0.971	0.970
V_m (cm³/mol)	113.8	127.5	208.9

Tabla 4.3: Cargas parciales del hidrógeno y silicio, orden de enlace y volumen molar de los distintos silanos.

La influencia *trans* del silicio en el catalizador puede observarse analizando las distancias para la reacción de un mismo silano con diferentes catalizadores. En la Tabla 4.4 se dan las distancias más relevantes para el Me₂PhSiH. Para observar la influencia *trans*, nos fijamos en las distancias Ir-O_{H₂O} en C₀ e Ir-H_{Si} en C₁. En el primer caso, estas distancias son 2.456, 2.413 y 2.361 para los catalizadores **2-SSiS**, **2-SGeS** y **2-SCS**, respectivamente. La influencia *trans* en el primer caso hace que la distancia Ir-O aumente, siendo esta interacción más débil que en **2-SGeS** y **2-SCS**. En este caso, esta interacción es más fuerte y la penalización energética a pagar aumentaría. Esta tendencia también es observada en la distancia Ir-H, siendo la correspondiente al catalizador **2-SSiS** la más larga, 1.722, y la más corta la del **2-SCS** con 1.683.



Me ₂ PhSiH	2-SSiS		2-SGeS		2-SCS	
	C ₀	C ₁	C ₀	C ₁	C ₀	C ₁
Ir-Si	5,071	4,918	5,047	4,881	5,034	4,794
Ir-O _{H₂O}	2,456	3,855	2,413	3,838	2,361	3,710
Ir-H _{Si}	3,661	1,722	3,671	1,692	3,682	1,683
H _{Si} -H _{H₂O}	1,836	1,704	1,812	1,716	1,825	1,790
Si-O	3,777	1,781	3,861	1,780	3,930	1,778
Si-H	1,508	3,415	1,506	3,407	1,508	3,460
H ^{δ-}	-0,480	-0,378	-0,483	-0,344	-0,493	-0,333
H ^{δ+}	0,433	0,522	0,436	0,513	0,440	0,497

Tabla 4.4: Distancias relevantes en la hidrólisis de fenildimetilsilano (en Å) y cargas parciales atómicas de los hidrógenos de fenildimetilsilano y del agua en presencia de distintos catalizadores.

Además de ello, en la Tabla 4.4 puede observarse una distancia relativamente corta entre el H del agua y el H del hidruro. Estas distancias cortas son indicativas de una interacción intermolecular, debido a las cargas parciales de ambos H. Estas cargas parciales pueden observarse en la Tabla 4.4.

En resumen, tanto los efectos electrónicos en los catalizadores, y tanto los electrónicos como estéricos de los silanos afectan a los perfiles de reacción de la etapa limitante en la transferencia de H estudiada, y pudieran explicar las constantes cinéticas y KIEs experimentales. En la siguiente sección se discutirán conjuntamente ambos aspectos.

4.3 Discusión experimental/teórica

La presencia de efecto túnel en la hidrólisis de trietilsilano en presencia del catalizador **2-SSiS** ha sido demostrada en trabajos anteriores. Partiendo de esta base, y con los resultados obtenidos de forma experimental y mediante química computacional, ambos mostrados en la tabla 4.5, podemos argumentar en qué reacciones podrá ocurrir dicho efecto.



Catalizador	Silano	k_H	k_D	KIE	ΔG_H^{TS}	ΔG_D^{TS}	ΔG_H^{int}	$d_{Ir-Si}(C_0)$
2-SSiS	Et₃SiH	34.98	0.10	346	53.93	56.99	-25.45	5.142
	Me₂PhSiH	219.2	50.6	4	59.06	62.08	1.20	5,071
	Ph₃SiH	1.58	0.094	17	80.99	87.00	10.08	5.074
2-SGeS	Et₃SiH	0.65	0.15	4	75.43	77.45	-28.74	5.150
	Me₂PhSiH	4.78	3.74	1.71	39.31	39.92	-23.50	5,047
	Ph₃SiH	0.26	0.15	1.28	81.31	82.84	-3.57	5.455
2-SCS	Et₃SiH	-	-	-	78.50	80.20	-45.73	5.050
	Me₂PhSiH	-	-	-	47.69	43.52	-30.22	5,034
	Ph₃SiH	-	-	-	85.47	88.94	-14.06	5.145

Tabla 4.5: Resultados experimentales (constantes cinéticas k_H y k_D en $s^{-1}M^{-1}$ y KIE) y teóricos (ΔG_H^{TS} , ΔG_D^{TS} y ΔG_H^{int} en kJ/mol y d_{Ir-Si} en Å) de las hidrólisis de trietilsilano, fenildimetilsilano y trifenilsilano en presencia de **2-SSiS**, **2-SGeS** y **2-SCS**.

Si comparamos los silanos bajo un mismo catalizador (**2-SSiS**), destacan por un lado las diferencias entre trietilsilano y trifenilsilano. Las constantes cinéticas de trietilsilano ($k_H=34.98$, $k_D=0.10$), a excepción de si el silano se encuentra deuterado, son más elevadas que las obtenidas para trifenilsilano ($k_H= 1.58$, $k_D = 0.094$), lo que indica que si los silanos no son deuterados, la hidrólisis de trifenilsilano es la que ocurrirá más despacio de las dos. Del mismo modo, sus KIEs difieren de manera notable ($KIE_{Et_3} = 346$, $KIE_{Ph_3} = 17$), demostrando que la participación de efecto túnel es mayor utilizando trietilsilano que con trifenilsilano. Por otro lado, los valores obtenidos de ΔG_H^{TS} ($Et_3 = 53.93$, $Ph_3 = 80.99$) así como de ΔG_H^{int} ($Et_3 = -25.45$, $Ph_3 = 10.08$) son superiores para trifenilsilano. Esto implica una mayor barrera de potencial a superar y una menor estabilización de C_1 respecto de C_0 al utilizar como reactivo trifenilsilano, por lo que resulta más difícil que suceda la reacción y menos probable la aparición de efecto túnel, lo que concuerda con los resultados cinéticos experimentales.

En el apartado 4.1.3 se ha explicado que teniendo en cuenta únicamente los resultados experimentales de fenildimetilsilano (k_H , k_D y KIE) no es posible determinar si las elevadas constantes cinéticas obtenidas con **2-SSiS** son producto de una mayor activación de este

catalizador en comparación con **2-SGeS**, y por tanto una menor energía de activación, o la presencia de efecto túnel tanto para Me₂PhSiH como para Me₂PhSiD. Sin embargo, dado que la barrera de potencial obtenida de manera teórica ($\Delta G_H^{TS} = 59.06$ kJ/mol) posee un valor similar al trietilsilano ($\Delta G_H^{TS} = 53.93$ kJ/mol), se puede considerar que en el caso de la hidrólisis de fenildimetilsilano también ocurre efecto túnel, con la principal diferencia que en este caso el silano deuterado también presenta dicho efecto, con una barrera ($\Delta G_D^{TS} = 62.08$ kJ/mol). Nótese que aunque las barreras son algo más altas que para el Et₃SiH, también son más estrechas ya que la distancia entre el iridio y el silicio es menor para el Me₂PhSiH.

Los resultados obtenidos para un mismo silano en presencia de **2-SSiS** o de **2-SGeS**, presentan varias diferencias. La energía de activación es menor con **2-SGeS** que con **2-SSiS**, al igual que ΔG_H^{int} , lo que provocaría que la aparición de efecto túnel sea mayor al utilizar el catalizador de germanio. Sin embargo, las constantes cinéticas obtenidas difieren de manera significativa, siendo más elevadas con el catalizador de silicio e indicando por tanto que en el caso de **2-SGeS**, no ocurre efecto túnel. Esto puede ser debido a la menor influencia *trans* del germanio respecto al silicio, generando una mayor estabilidad en la molécula de agua coordinada inicialmente con el iridio, dificultando que exista una vacante libre en el catalizador y, por tanto, ralentizando la reacción e impidiendo que suceda efecto túnel en presencia de **2-SGeS**. Esta mayor estabilidad de la molécula de agua coordinada queda reflejada en las distancias Ir-O_{H₂O} en C₀ (**2-SSiS** = 2.456 Å, **2-SGeS** = 2.413 Å) que aparecen en la tabla 4.4. Por ello, pese a que las constantes cinéticas de fenildimetilsilano son ligeramente más elevadas que las pertenecientes a los otros dos silanos, no consideramos se deba a que en esta reacción ocurra efecto túnel, sino que dada la menor barrera de potencial resulta más sencillo que la reacción transcurra por método clásico.

Debido a que **2-SCS** no ha podido ser sintetizado en el laboratorio, los resultados obtenidos para las hidrólisis en presencia de este catalizador son únicamente teóricos. Si comparamos estos resultados con los otros catalizadores, podemos observar que los valores de ΔG^{TS} no difieren en gran medida de los obtenidos en los otros casos. Como ha quedado claro con las reacciones en presencia de **2-SGeS**, un dato menor de ΔG^{TS} no tiene por qué significar que ocurra efecto túnel. Fijándonos de nuevo en la tabla 4.4, las distancias Ir-O_{H₂O} y Ir-H_{Si} de **2-SCS** destacan por ser las menores de los tres catalizadores. Esto indica que, nuevamente, la influencia *trans* genera una mayor estabilidad del complejo aquo (C₀), lo que dificulta



conseguir una vacante en el catalizador para que pueda suceder efecto túnel. Por otra parte, la menor distancia de Ir-H_{S₁} en C₁ indica que una vez el hidruro ocupe la vacante del catalizador, será más estable que en presencia de los demás catalizadores, tal y como corrobora que los valores de ΔG_H^{int} obtenidos sean menores en **2-SCS**.

Conclusiones

La síntesis del complejo **2-SGeS** y las posteriores hidrólisis de Me_2PhSiH y Ph_3SiH realizadas utilizando este complejo como catalizador han permitido el estudio cinético de estas reacciones y su comparación con las llevadas a cabo en trabajos anteriores. Se ha determinado la mayor actividad como catalizador del complejo **2-SSiS**, debido principalmente a que con este catalizador existen evidencias de efecto túnel con los tres silanos estudiados, mientras que en presencia de **2-SGeS** no se observa dicho efecto.

Tras estudiar los resultados teóricos obtenidos, es posible identificar la importancia de los silanos en la aparición de efecto túnel durante la etapa limitante del proceso de generación de hidrógeno. El hecho que el trifenilsilano haya sido el silano cuya hidrólisis posee una mayor energía de activación independientemente del catalizador utilizado indica que los efectos más relevantes a la hora de elegir un silano son: a) El efecto estérico ya que pueden impedir el ataque nucleófilo que da comienzo a la reacción y el acercamiento del silano al catalizador y b) cómo de electrófilo es el silicio, ya que facilita el ataque nucleófilo y aumenta la naturaleza hidruro del hidrógeno.

Además, la comparación entre los resultados experimentales y teóricos ha permitido proponer el por qué de la ausencia de efecto túnel en las reacciones llevadas a cabo con **2-SGeS** y **2-SCS**. Esto ha demostrado que la barreras de potencial no son la única clave para la aparición de efecto túnel, sino la estabilidad del agua como ligando del catalizador y la dificultad para obtener una vacante libre, provocada por la influencia *trans* del Si, Ge o C en cada caso.

Conclusions

Complex **2-SGeS** has been synthesized and the hydrolysis of Me_2PhSiH and Ph_3SiH has been carried out using this complex as a catalyst. The results obtained have been compared with the previously reported. As a conclusion, the high activity of **2-SSiS** complex in the hydrolysis of silanes with the three silanes used is due to the participation of quantum tunneling. In the case of use **2-SGeS** as catalyst this effect is not observed experimentally.

The importance of silanes nature in the presence of hydrogen tunneling has been studied by theoretical calculations. Triphenylsilane, which has the highest activation energy, regardless of what catalyst was used, indicates that the most relevant effects in terms of the silanes used are: a) The steric effect, since they can prevent the nucleophilic attack that starts the reaction and the approach of the silane to the catalyst and b) how electrophilic the silane is, since it facilitates the nucleophilic attack and increases the hydride nature of the hydrogen.

Furthermore, the comparison between the experimental and theoretical results has allowed to determine the absence of tunnel effect in the reactions carried out with **2-SGeS**, and with **2-SCS**. This has shown that the activation energy is not only key to the presence of tunneling effect. The stability of water as a ligand and the difficulty in obtaining a free vacancy, caused by the *trans* influence of Si, Ge or C in each case are also important points for hydrogen tunneling.

Bibliografía

1. Jan Meisner and Johannes Kästner, *Atom Tunneling in Chemistry*, *Angewandte Chemie International Edition*, **2016**, 5, 5400-5413
2. Eugen Merzbacher, *The Early History of Quantum Tunneling*, *Physics Today*, **2002**, 55 (8), 44-49
3. Leo Esaki, *Long Journey Into Tunneling*, *Nobel Lecture*, **1973**, 116-133
4. Mohsen Razavy, *Quantum Theory of Tunneling*, 2014
5. Frank Trixler, *Quantum Tunneling to the Origin and Evolution of Life*, *Current Organic Chemistry*, **2013**, 17, 1758-1770
6. Aleksander Vilenkin, *Creation of Universes from Nothing*, *Physics Letters B*, **1982**, 117, 25-28
7. Per-Olov Löwdin, *Quantum Genetic and the Aperiodic Solid: Some Aspects on the Biological Problem of Heredity, Mutations, Aging, and Tumors in View of the Quantum Theory of the DNA Molecule*, *Advances in Quantum Chemistry*, **1966**, 2, 213-360
8. Michael J. Sutcliffe and Nigel S. Scrutton, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **2000**, 358(1766), 367-386
9. Julien Buendia, Gwendal Grelier and Philippe Dauban, *Dirhodium(II)-Catalyzed C(sp³)-H Amination Using Iodine(III) Oxidants*, *Advances in Organometallic Chemistry*, **2015**, 64, 77-112
10. Didier Astruc, *Organometallic Chemistry and Catalysis*, Springer, 2007, DOI:[10.1007/978-3-540-46129-6](https://doi.org/10.1007/978-3-540-46129-6)
11. Hamid Mahmoudi, Maedeh Mahmoudi et. al., *A review of Fischer Tropsch synthesis process, mechanism, surface chemistry and catalyst formulation*, *Biofuels Engineering*, **2017**, 2, 11-31
12. Robert H. Crabtree, Montserrat Diéguez et. al., *Topics in Organometallic Chemistry Volume 34: Iridium Catalysis*, **2011**
13. Ricardo R. Contreras, Eduardo Cardozo-Villalba et. al., *Vaska's complex and the organometallic chemistry*, *Novasinerгия*, **2020**, 3(1), 96-110
14. Ricardo R. Contreras, Jesús Urbina-Gutierrez et. al., *The Crabtree's catalyst. A mini review*, *Revista Ciencia e Ingeniería*, **2020**, 41(1), 3-14



15. Arun Dixith Reddy Shada, Alexander J. M. Miller et. al., *Catalytic Dehydrogenation of Alkanes by PCP-pincer Iridium Complexes Using Proton and Electron Acceptors*, ACS Catalysis, **2021**, 11(5), 3009-3016
16. Kenichi Fujita, *Development and Application of New Iridium Catalysts for Efficient Dehydrogenative Reactions of Organic Molecules*, Bulletin of the Chemical Society of Japan, **2019**, 92(2), 344-351
17. Abhi Karkamkar, Chris Aardahl, Tom Autrey, *Recent Developments on Hydrogen Release from Ammonia Borane*, Material Matters, **2007**, 2, 6-9
18. Yangbin Shen, Yulu Zhan et. al., *Hydrogen generation from methanol at near room temperature*, Chemical Science, **2017**, 8(11), 7498-7504
19. Karin Garcés, Francisco J. Fernández-Álvarez et. al., *Iridium-Catalyzed Hydrogen Production from Hydrosilanes and Water*, ChemCatChem, **2014**, 6(6), 1691-1697
20. M. J. Frisch et. al., *Gaussian 09, Revision D.01*, Gaussian Inc., Wallingford, CT2009
21. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **1964**, 136, B864.
22. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **1965**, 140, A1133.
23. Y. Zhao and D. G. Truhlar, *Theor. Chem. Acc.*, **2008**, 120, 215-41.
24. W. J. Hehre, R. Ditchfield and J. A. Pople, *J. Chem. Phys.*, **1972**, 56, 2257.
25. Dolg, M.; Wedig, U.; Stoll, H.; Preuss, H. *J. Chem. Phys.* **1987**, 86, 866.
26. Martin, J. M. L.; Sundermann, A. *J. Chem. Phys.* **2001**, 114, 3408.
27. G. Scalmani and M. J. Frisch, *J. Chem. Phys.*, **2010**, 132 114110
28. R. Krishnan, J. S. Binkley, R. Seeger and J. A. Pople, *J. Chem. Phys.*, **1980**, 72, 650
29. A. E. Reed, R. B. Weinstock and F. Weinhold, *J. Chem. Phys.*, **1985**, 83, 735. 53
30. A. E. Reed, F. Weinhold, *J. Chem. Phys.*, **1985**, 83, 1736
31. A. E. Reed, L. A. Curtiss and F. Weinhold, *Chem. Rev.*, **1988**, 88, 899-926.

Anexos

Anexo 1: ^1H - ^1H COSY RMN y ^1H - ^{13}C HSQC RMN de *SGeS* y *1-SGeS*.

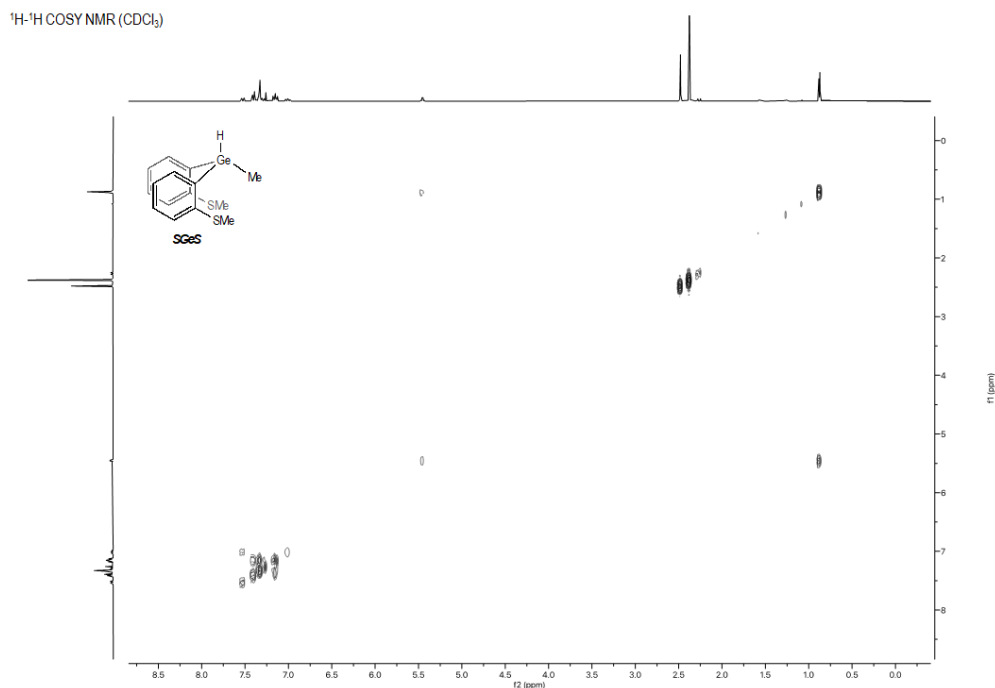


Figura A.1: ^1H - ^1H COSY RMN de *SGeS*.

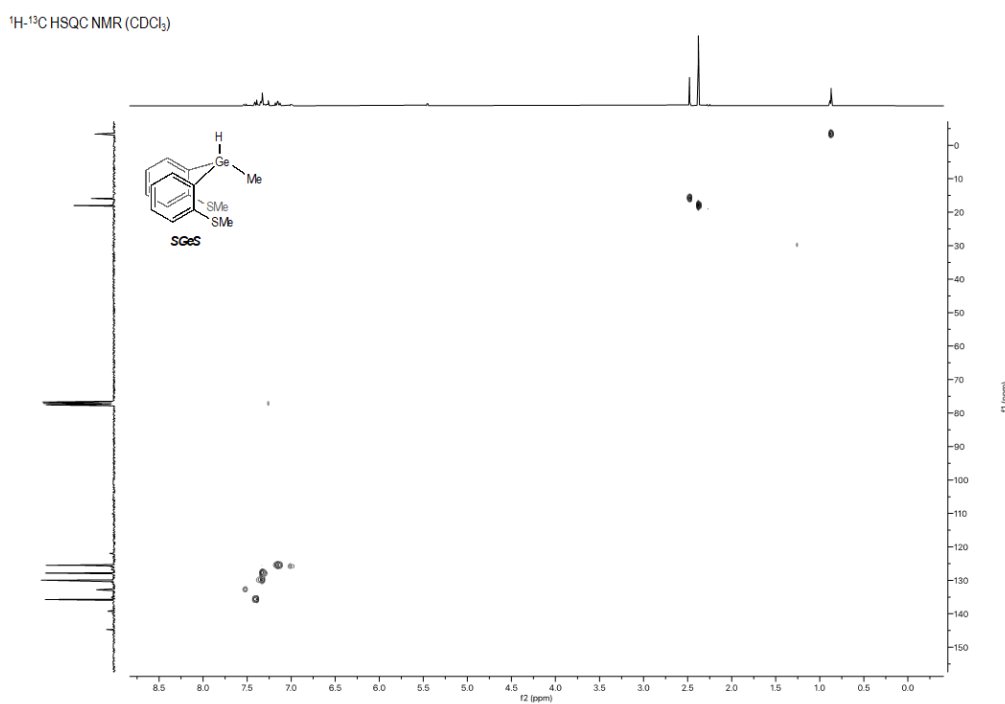


Figura A.2: ^1H - ^{13}C HSQC RMN de *SGeS*.



^1H - ^1H COSY NMR (CD_2Cl_2)

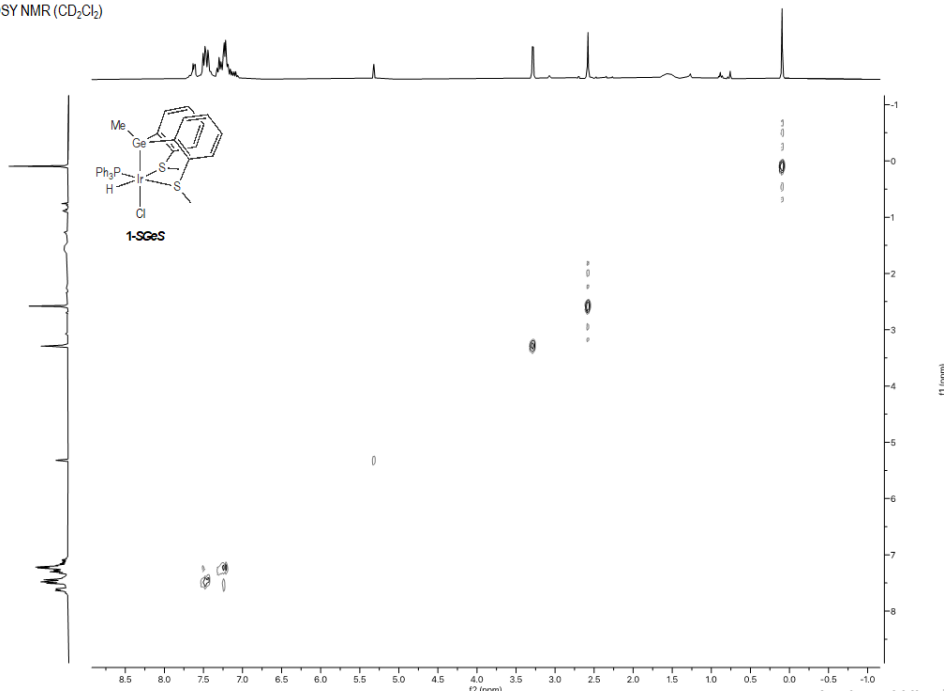


Figura A.3: ^1H - ^1H COSY RMN de 1-SGeS.

^1H - ^1H COSY NMR (CD_2Cl_2)

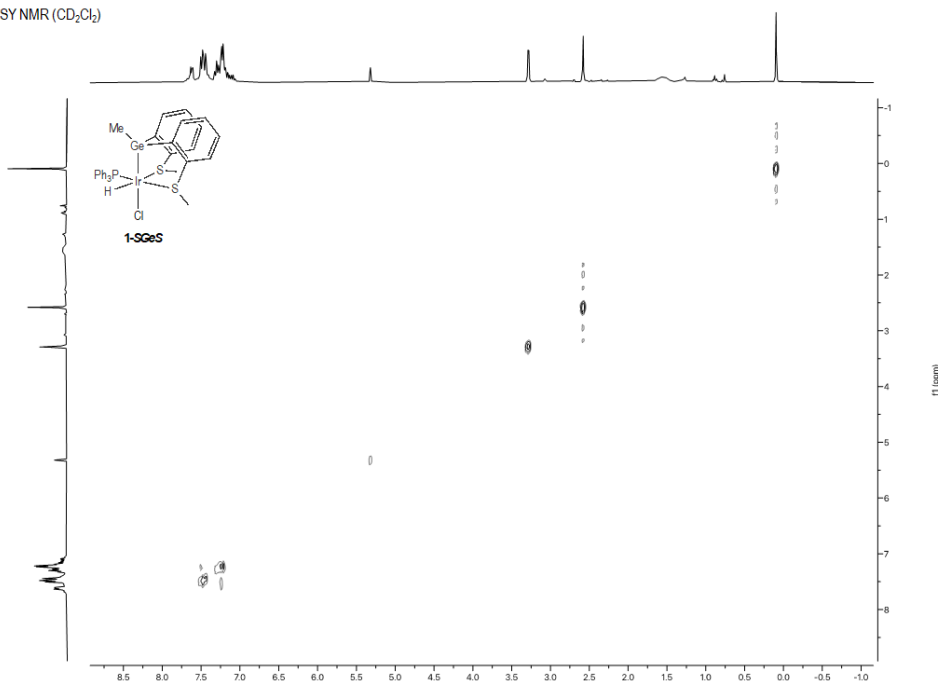


Figura A.4: ^1H - ^{13}C HSQC RMN de 1-SGeS.



Anexo 2: Coordenadas de las estructuras calculadas en este trabajo.

Et₃SiH Número de átomos: 23

Si	-0.011324	0.027405	-0.009857
H	-0.017196	0.042057	1.487267
C	1.785925	0.000188	-0.589914
C	-0.921155	-1.513579	-0.612457
C	-0.871271	1.587562	-0.634019
H	1.801582	0.149718	-1.680819
H	2.300384	0.872320	-0.160906
C	2.523259	-1.284059	-0.213824
H	3.580908	-1.257096	-0.503951
H	2.486911	-1.462439	0.869480
H	2.076423	-2.161654	-0.699153
C	-0.898369	-1.666997	-2.133318
H	-0.478756	-2.398611	-0.132439
H	-1.958360	-1.463203	-0.250191
H	-1.434410	-2.564226	-2.466585
H	-1.365586	-0.807916	-2.632544
H	0.128232	-1.743277	-2.516152
H	-0.846390	1.578355	-1.734442
H	-1.934118	1.533033	-0.355733
C	-0.246546	2.878107	-0.105315
H	-0.785115	3.770674	-0.447096
H	-0.241910	2.899897	0.992585
H	0.795188	2.983741	-0.434890

Me₂PhSiH Número de átomos: 21

C	-0.036073	-0.072717	0.028964
H	-0.053889	-0.086994	1.124740
Si	1.713137	0.010412	-0.643546
C	1.692133	0.066691	-2.521740
H	1.228064	-0.833799	-2.940711
C	2.599761	1.537770	0.013848
H	2.490484	-1.185156	-0.207093
H	-0.622024	0.790305	-0.311279
H	-0.539115	-0.978081	-0.329547
H	1.121013	0.937268	-2.866657
H	2.707241	0.147133	-2.928325
C	3.963746	1.726182	-0.260114
C	4.645900	2.853782	0.190599
C	3.971016	3.823807	0.931651
C	2.617847	3.657504	1.217398
C	1.943255	2.524433	0.762059
H	4.508452	0.974769	-0.835155
H	5.703646	2.976724	-0.033540
H	4.500052	4.705844	1.286355



H	2.086472	4.410097	1.796610
H	0.884727	2.412981	0.998504

Ph₃SiH Número de átomos: 35

C	0.103626	-0.359312	0.032615
C	0.022959	0.016411	1.380246
C	1.210445	0.364510	2.042067
C	2.437424	0.336910	1.383800
C	2.497106	-0.042327	0.042950
C	1.329165	-0.390636	-0.632535
Si	-1.601923	-0.001777	2.321420
C	-1.690290	-1.528832	3.410539
C	-3.040286	0.001604	1.114055
H	-1.681513	1.213538	3.177907
H	1.177378	0.660074	3.092141
H	3.346874	0.611483	1.914074
H	3.453679	-0.064386	-0.474811
H	1.372099	-0.686082	-1.678800
H	-0.803842	-0.631859	-0.508272
C	-2.620896	-1.590631	4.459204
C	-2.741141	-2.731554	5.249106
C	-1.927851	-3.837125	5.000606
C	-0.998021	-3.795708	3.963959
C	-0.881621	-2.649399	3.178308
H	-3.264490	-0.732862	4.662299
H	-3.467232	-2.759434	6.058828
H	-2.018679	-4.729417	5.616315
H	-0.361449	-4.656034	3.768013
H	-0.147314	-2.629027	2.371836
C	-3.766659	-1.161776	0.825935
C	-4.800105	-1.150580	-0.110486
C	-5.125946	0.030974	-0.773121
C	-4.416171	1.200093	-0.498920
C	-3.384363	1.181171	0.436221
H	-3.524148	-2.092565	1.340750
H	-5.352364	-2.063994	-0.321292
H	-5.933537	0.042509	-1.502018
H	-4.668678	2.125105	-1.013026
H	-2.835154	2.101938	0.640425

CO_2SSiS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

C	-3.408959	0.381832	-2.184732
C	-2.072075	0.133040	-2.525951
C	-1.709156	-0.507330	-3.709140
C	-2.706951	-0.903613	-4.598249



C	-4.044296	-0.647076	-4.299756
C	-4.386822	-0.012249	-3.106307
S	-0.742986	0.639989	-1.407781
C	-0.436410	2.315565	-2.072160
Si	-3.772273	1.139567	-0.477694
C	-5.523458	0.765551	0.085500
Ir	-1.924743	0.646801	0.809379
S	-1.656794	3.012521	1.133092
C	-2.464397	3.405293	2.720237
P	-2.163869	-1.663649	0.871561
C	-1.704458	-2.350195	2.521301
C	-1.324309	-3.694799	2.626518
C	-1.035177	-4.251421	3.868132
C	-1.115991	-3.472086	5.021237
C	-1.492456	-2.135241	4.927162
C	-1.788075	-1.576677	3.684363
C	-1.064481	-2.631760	-0.244226
C	0.274214	-2.230176	-0.324616
C	1.186902	-2.928508	-1.109562
C	0.766641	-4.050735	-1.822435
C	-0.556938	-4.473590	-1.734347
C	-1.467507	-3.772350	-0.946626
C	-3.844279	-2.341955	0.600125
C	-4.665795	-2.637213	1.693084
C	-5.972989	-3.075235	1.491973
C	-6.470970	-3.225389	0.199591
C	-5.659426	-2.928003	-0.893916
C	-4.355853	-2.483615	-0.695605
C	-3.711318	3.033554	-0.719054
C	-2.798269	3.815035	-0.008758
C	-2.693814	5.195978	-0.177899
C	-3.539769	5.828252	-1.084104
C	-4.462821	5.077596	-1.812784
C	-4.543258	3.699298	-1.630593
O	0.101340	0.588401	2.199279
O	4.463390	-2.289751	-1.712959
C	4.437610	-2.869648	-3.015638
C	5.797377	-3.541356	-3.175130
C	6.195413	-3.892013	-1.726395
C	5.081691	-3.270725	-0.878795
O	6.396361	-0.203796	-1.633963
O	6.977129	-0.519467	1.131678
C	6.997517	0.807072	1.672827
C	8.350956	1.352896	1.269571
C	9.237201	0.130367	1.497291
C	8.324014	-1.026259	1.090326
C	3.528700	-0.413688	0.784811



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

Si	2.983450	0.995339	-0.333044
C	2.951890	0.560414	-2.152179
C	4.042159	2.503146	0.027734
H	3.964276	0.319809	-2.497905
H	-0.658503	-0.701804	-3.925625
H	-2.438809	-1.414343	-5.519811
H	-4.823210	-0.954931	-4.993791
H	-5.440078	0.152669	-2.875415
H	-5.264634	3.128438	-2.217460
H	-5.116305	5.569788	-2.529310
H	-3.470691	6.903435	-1.229155
H	-1.956608	5.767834	0.383786
H	-5.674917	1.228745	1.069210
H	-6.255847	1.203673	-0.605636
H	-5.726366	-0.306786	0.173000
H	-1.913370	2.866558	3.495816
H	-2.399660	4.483318	2.890799
H	-3.505271	3.071890	2.691170
H	0.299244	2.800173	-1.421853
H	-0.025019	2.206692	-3.079695
H	-1.360106	2.901081	-2.101644
H	-4.289274	-2.528645	2.709152
H	-6.601180	-3.302293	2.349823
H	-7.490041	-3.571131	0.044516
H	-6.040253	-3.034310	-1.907600
H	-3.743077	-2.240507	-1.562534
H	-2.490670	-4.133330	-0.875283
H	-0.886019	-5.357561	-2.275192
H	1.472075	-4.602384	-2.440465
H	2.224407	-2.593450	-1.169436
H	0.612062	-1.359671	0.238138
H	-2.095221	-0.533986	3.620625
H	-1.560740	-1.521076	5.821832
H	-0.885660	-3.907335	5.990622
H	-0.743671	-5.296837	3.933851
H	-1.254640	-4.316616	1.735331
H	-2.837688	0.620085	2.122172
H	1.593309	1.380068	0.098035
H	4.567148	-0.692790	0.564750
H	2.909019	-1.313217	0.672128
H	2.312770	-0.314063	-2.333115
H	2.574470	1.399561	-2.749289
H	5.702408	-0.875334	-1.759312
H	6.585877	-0.247356	-0.678799
H	0.296464	-0.202828	2.719808
H	0.902325	0.799260	1.694878
H	6.142615	1.353404	1.254241



H	6.890946	0.764450	2.769122
H	8.653083	2.228746	1.852413
H	8.335032	1.633675	0.206454
H	10.164976	0.149765	0.917985
H	9.505126	0.054184	2.558603
H	8.404176	-1.890827	1.761177
H	8.516445	-1.367580	0.063099
H	5.433464	-2.763903	0.027864
H	4.323882	-4.020205	-0.590902
H	6.265973	-4.971423	-1.559798
H	7.167728	-3.454871	-1.473707
H	6.516345	-2.840868	-3.614214
H	5.745858	-4.417866	-3.828188
H	3.618157	-3.608026	-3.067223
H	4.233208	-2.070486	-3.735915
H	3.495198	-0.095741	1.836359
C	5.115722	2.880246	-0.791620
C	5.938493	3.952427	-0.447960
C	5.705492	4.662188	0.728734
C	4.641189	4.304418	1.556243
C	3.818388	3.237325	1.202789
H	5.329738	2.312265	-1.696959
H	6.769176	4.227507	-1.094917
H	6.350414	5.495318	1.000018
H	4.452971	4.858569	2.473477
H	2.988094	2.971063	1.861277

TS_2SSiS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

Si	3.000859	0.274197	-1.020938
Ir	-1.158010	0.475636	0.052954
H	1.014348	0.499330	-1.076474
H	0.538918	1.344119	-2.483606
O	0.363274	1.782220	-3.341540
H	0.743178	2.662528	-3.240137
H	3.772628	-0.143286	-3.327513
C	2.962771	-0.545980	-2.707520
H	2.015464	-0.409371	-3.234901
H	3.145328	-1.621786	-2.580249
C	2.792582	-0.663674	0.586926
H	2.038222	-0.186848	1.223466
H	3.731352	-0.764718	1.146881
H	2.424524	-1.673534	0.360119
C	3.191593	2.134624	-0.922990
C	3.328299	2.916177	-2.079662
H	3.336139	2.437353	-3.060005
C	3.452495	4.302011	-2.001131
H	3.553577	4.890413	-2.910674



Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	3.544911	6.015736	-0.693603
C	3.451218	4.934034	-0.757084
C	3.338628	4.171904	0.403538
H	3.345923	4.657538	1.378717
C	3.213866	2.785274	0.316310
H	3.133527	2.200221	1.235835
O	4.975828	0.041157	-1.053017
H	5.529866	0.524666	-0.382086
H	5.219672	-0.920726	-1.035500
O	6.514490	1.355978	0.662509
C	6.799202	2.714548	0.274154
H	7.651000	2.700369	-0.413469
H	5.920664	3.118359	-0.252518
C	7.066225	3.456531	1.571068
H	6.830341	4.522667	1.492847
H	8.120091	3.358780	1.860745
C	6.170848	2.713127	2.558793
H	5.133655	3.060441	2.469520
H	6.480861	2.832230	3.601123
C	6.293433	1.277410	2.081167
H	7.152373	0.766462	2.538675
H	5.393641	0.673260	2.258380
O	5.238278	-2.593136	-0.844704
H	4.548622	-3.350985	0.953535
C	5.500136	-3.034003	0.500286
H	5.893015	-2.184193	1.074489
C	6.475316	-4.189035	0.365986
H	7.506830	-3.817401	0.317277
H	6.404783	-4.893869	1.199431
C	6.063820	-4.785970	-0.976631
H	6.836810	-5.411498	-1.432219
H	5.153998	-5.389849	-0.864584
C	5.773995	-3.538219	-1.788643
H	6.691366	-3.120872	-2.228603
H	5.034712	-3.681761	-2.584105
P	-1.211177	-1.827435	0.416441
C	-0.683935	-2.893183	-0.990498
C	-0.962214	-4.268503	-0.982400
C	-0.546567	-5.079490	-2.031941
C	0.146017	-4.526897	-3.109877
C	0.425424	-3.164259	-3.126601
C	0.014242	-2.350655	-2.070818
H	0.243774	-1.284979	-2.084396
H	0.463034	-5.159605	-3.935639
H	-0.767773	-6.143975	-2.010550
H	-1.506953	-4.711808	-0.149812
H	0.961518	-2.726531	-3.966092



C	-2.818210	-2.617218	0.853676
C	-3.735450	-2.895919	-0.168026
H	-3.484938	-2.678228	-1.205882
C	-4.965733	-3.472531	0.123598
H	-5.663401	-3.685555	-0.683343
C	-5.305087	-3.766519	1.443827
H	-6.269575	-4.213677	1.672961
C	-4.400946	-3.493039	2.465786
H	-4.651655	-3.729515	3.497341
C	-3.159812	-2.928456	2.171750
H	-2.456789	-2.743483	2.982173
C	-0.103585	-2.339609	1.801242
C	0.777799	-3.418131	1.685934
H	0.842429	-3.982701	0.758339
C	1.610270	-3.770486	2.747861
H	2.297845	-4.605788	2.634586
C	1.566343	-3.055995	3.940736
H	2.217182	-3.330145	4.767651
C	0.682545	-1.985002	4.069919
H	0.637271	-1.421232	4.998814
C	-0.139712	-1.626529	3.006875
H	-0.807653	-0.772807	3.114840
Si	-3.177713	0.967938	1.068616
C	-3.538825	0.608687	2.879429
H	-2.743297	1.031270	3.506340
H	-3.612310	-0.466025	3.083436
H	-4.484042	1.078348	3.183070
C	-4.548167	0.257277	-0.034633
C	-5.848751	-0.021916	0.402757
H	-6.100009	0.095288	1.457696
H	-7.833711	-0.676518	-0.118135
C	-6.831601	-0.460351	-0.482292
C	-6.530321	-0.629416	-1.832718
H	-7.293431	-0.974354	-2.526462
C	-5.240212	-0.374891	-2.292715
H	-4.986832	-0.528616	-3.340987
C	-4.270179	0.063922	-1.392526
S	-2.594878	0.337923	-2.023530
C	-2.844963	1.966933	-2.813159
H	-3.543007	1.840651	-3.644995
H	-1.863473	2.277813	-3.184221
H	-3.243179	2.684985	-2.089040
S	-0.773471	2.849303	-0.028047
C	-2.370518	3.628105	0.290957
C	-3.401425	2.855006	0.825252
C	-4.614681	3.509928	1.080734
C	-4.778157	4.866897	0.811015



C	-3.726368	5.607018	0.270700
C	-2.508951	4.986068	0.005944
H	-1.678382	5.546930	-0.420314
H	-3.855299	6.663939	0.050823
H	-5.731962	5.348880	1.013439
H	-5.456440	2.947342	1.486875
C	0.005510	3.269291	1.570254
H	-0.647582	2.945821	2.385628
H	0.168419	4.350786	1.601428
H	0.960883	2.741786	1.613332
H	-0.351249	0.526814	1.420342

C1_2SSi_Me₂Ph Número de átomos: 124

C	-3.874967	-2.916506	-0.135162
C	-2.875079	-2.694493	0.820961
C	-3.112630	-3.073429	2.144046
C	-4.331790	-3.645472	2.508371
C	-5.321414	-3.854173	1.552123
C	-5.086148	-3.495123	0.225077
P	-1.321416	-1.852608	0.291708
C	-0.806638	-2.964969	-1.092879
C	-0.106829	-2.455107	-2.187614
C	0.313853	-3.294862	-3.218305
C	0.039050	-4.658017	-3.164092
C	-0.659738	-5.179461	-2.075031
C	-1.082186	-4.339655	-1.049593
Ir	-1.433550	0.399140	-0.146486
S	-1.276985	2.767208	-0.476287
C	0.103949	3.324962	0.574411
S	-3.131587	0.081008	-1.950572
C	-4.755546	0.016489	-1.134377
C	-4.877311	0.300360	0.229293
C	-6.153412	0.152978	0.792445
C	-7.250728	-0.245912	0.032404
C	-7.096516	-0.510317	-1.327826
C	-5.840187	-0.386577	-1.914712
Si	-3.334714	0.874932	1.213574
C	-3.519213	2.792657	1.167803
C	-2.642210	3.567085	0.407513
C	-2.770453	4.951739	0.275052
C	-3.797231	5.603625	0.949376
C	-4.686416	4.865016	1.731565
C	-4.546360	3.483549	1.830987
C	-3.363969	1.610406	-2.919126
C	-0.142360	-2.285948	1.644703
C	0.735684	-3.369457	1.552804
C	1.605185	-3.669699	2.601280



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	1.600472	-2.897510	3.758951
C	0.723325	-1.818091	3.863302
C	-0.134993	-1.511518	2.812137
C	-3.637496	0.414201	3.027354
O	-0.047543	1.254925	-3.640583
C	2.955804	-0.509629	-2.781083
Si	3.379149	0.253428	-1.148575
C	3.287219	2.113055	-1.122213
O	5.134220	-0.022841	-1.028028
C	2.688119	-0.560829	0.364765
O	6.328478	-2.208916	-1.092559
C	6.390180	-2.679246	0.277384
C	7.778496	-2.308230	0.755488
C	8.599819	-2.514833	-0.513650
C	7.675204	-1.968109	-1.584607
O	6.416272	0.921422	0.956444
C	7.383323	1.960086	0.678913
C	7.539858	2.699552	1.991981
C	7.336256	1.577251	3.005805
C	6.197831	0.798828	2.377827
H	5.603073	0.392846	-0.227929
H	5.545212	-0.968899	-1.146024
H	-0.035911	0.306615	-1.147385
H	1.610644	-0.358473	0.430826
H	2.826921	-1.649341	0.318644
H	1.940236	-0.232297	-3.092390
H	3.013154	-1.603229	-2.719683
H	-0.418387	0.588275	1.063866
H	1.007577	2.831798	0.201177
H	0.204892	4.410488	0.485621
H	-0.089378	3.030434	1.609242
H	-2.808970	0.783341	3.646214
H	-4.563405	0.855206	3.420546
H	-3.703847	-0.673681	3.157005
H	-2.074979	5.514016	-0.347364
H	-3.907340	6.681806	0.859929
H	-5.495192	5.369149	2.256457
H	-5.262121	2.926666	2.437196
H	-3.568033	2.456943	-2.255346
H	-2.440217	1.771358	-3.481881
H	-4.199545	1.465905	-3.608939
H	-5.701078	-0.621186	-2.969942
H	-7.946376	-0.828901	-1.927235
H	-8.226675	-0.356635	0.500841
H	-6.295001	0.346804	1.856619
H	-3.702683	-2.650055	-1.178295
H	-5.851144	-3.655887	-0.531684



H	-6.271294	-4.300934	1.836714
H	-4.501778	-3.932707	3.543710
H	-2.346659	-2.927175	2.904121
H	0.097407	-1.386098	-2.229313
H	0.849024	-2.876723	-4.068733
H	0.361485	-5.313928	-3.969527
H	-0.880598	-6.243271	-2.025318
H	-1.628993	-4.761578	-0.207066
H	-0.802917	-0.655081	2.892926
H	0.709682	-1.208978	4.764368
H	2.276486	-3.133716	4.577637
H	2.287627	-4.511752	2.507588
H	0.763254	-3.982168	0.654335
H	-0.163490	0.979462	-2.707741
H	-0.001565	2.217247	-3.609334
H	6.230163	-3.764773	0.273907
H	5.568441	-2.206130	0.830857
H	8.110142	-2.923869	1.596178
H	7.806912	-1.251414	1.060959
H	9.562494	-1.996350	-0.498941
H	8.789214	-3.582885	-0.676661
H	7.770349	-2.455009	-2.558861
H	7.796822	-0.882072	-1.714334
H	5.220163	1.238411	2.626770
H	6.180985	-0.267132	2.632169
H	7.093160	1.932550	4.010784
H	8.236875	0.951983	3.068917
H	8.510164	3.196056	2.077722
H	6.753318	3.459058	2.098833
H	6.996440	2.572828	-0.143763
H	8.319392	1.477949	0.361064
H	3.163058	-0.189439	1.282977
H	3.651437	-0.164837	-3.555422
C	3.746166	2.838145	-0.010869
C	3.698734	4.229451	0.009514
C	3.173999	4.920594	-1.082247
C	2.705165	4.218929	-2.191333
C	2.769249	2.826574	-2.212381
H	4.150459	2.313271	0.856975
H	4.064470	4.773607	0.877673
H	3.130127	6.007233	-1.067412
H	2.296780	4.756894	-3.044058
H	2.407115	2.288372	-3.088656

CO_2SSiS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-2.999446	-0.583286	-2.616634
C	-1.608706	-0.456397	-2.492450



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	-0.722122	-1.098635	-3.354892
C	-1.229813	-1.881554	-4.390228
C	-2.608432	-2.007034	-4.554101
C	-3.479635	-1.363761	-3.675435
S	-0.902336	0.533091	-1.152979
C	-0.754004	2.147334	-1.995036
Si	-4.083230	0.245428	-1.293419
C	-5.797586	-0.514660	-1.197458
Ir	-2.740389	0.462199	0.566326
S	-3.171070	2.824328	0.457058
C	-4.561264	3.146368	1.592310
P	-2.411614	-1.796078	1.026422
C	-2.243677	-2.052994	2.847195
C	-1.332379	-2.985031	3.359508
C	-1.224874	-3.186024	4.733919
C	-2.023900	-2.461751	5.614820
C	-2.937006	-1.535075	5.115882
C	-3.045562	-1.330386	3.742362
C	-0.868546	-2.574740	0.398202
C	0.323514	-1.858066	0.560981
C	1.540963	-2.394252	0.154733
C	1.579016	-3.661380	-0.423903
C	0.406521	-4.399132	-0.559610
C	-0.810789	-3.863324	-0.143320
C	-3.752178	-2.945224	0.534779
C	-4.735855	-3.335974	1.447710
C	-5.795361	-4.143248	1.037005
C	-5.880258	-4.571406	-0.285493
C	-4.902766	-4.185520	-1.201448
C	-3.849554	-3.372827	-0.795457
C	-4.367218	2.031994	-1.905553
C	-3.976114	3.123010	-1.128037
C	-4.134365	4.444395	-1.547131
C	-4.715815	4.691042	-2.787164
C	-5.117166	3.623598	-3.591062
C	-4.942131	2.313269	-3.153035
O	-1.531101	1.218000	2.594581
O	4.254721	-1.853885	-1.401267
C	4.164978	-2.300502	-2.762751
C	5.050959	-3.533822	-2.865078
C	6.092115	-3.259405	-1.783048
C	5.233339	-2.628768	-0.703760
O	5.993992	0.435625	-1.628701
O	8.055687	-0.196991	0.244194
C	9.016035	0.647620	-0.394159
C	9.655063	-0.254969	-1.430516
C	9.783156	-1.573167	-0.659388



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	8.673635	-1.480365	0.400865
Si	2.119996	1.870209	0.943332
H	0.353219	-0.997100	-3.207865
H	-0.548653	-2.396552	-5.063277
H	-3.005156	-2.618300	-5.361625
H	-4.555258	-1.495243	-3.801797
H	-5.251659	1.491138	-3.800442
H	-5.561253	3.816070	-4.564981
H	-4.844937	5.714511	-3.130227
H	-3.799947	5.268503	-0.918605
H	-6.386097	0.072777	-0.480612
H	-6.305155	-0.458456	-2.169813
H	-5.791616	-1.558399	-0.867468
H	-4.212929	2.883090	2.594434
H	-4.815276	4.208815	1.546900
H	-5.414174	2.523977	1.308528
H	-0.430534	2.876400	-1.243798
H	0.019247	2.055967	-2.764829
H	-1.707777	2.452755	-2.435716
H	-4.681870	-3.017041	2.486850
H	-6.553607	-4.440229	1.757435
H	-6.706054	-5.203711	-0.602213
H	-4.960249	-4.509788	-2.238425
H	-3.102681	-3.069501	-1.527776
H	-1.709907	-4.466795	-0.234866
H	0.434079	-5.399451	-0.985059
H	2.528554	-4.076912	-0.756068
H	2.463139	-1.824549	0.273195
H	0.307091	-0.870062	1.020647
H	-3.761805	-0.602811	3.362105
H	-3.567708	-0.966662	5.795054
H	-1.935276	-2.617693	6.687122
H	-0.510620	-3.912127	5.114627
H	-0.696923	-3.560531	2.689126
H	-4.018564	0.317045	1.518063
H	0.685246	1.444454	1.023859
H	5.212388	-0.137623	-1.550225
H	6.615112	0.106248	-0.955300
H	-1.509899	0.547513	3.293390
H	-0.614496	1.498916	2.459332
H	8.482662	1.512931	-0.800635
H	9.753391	0.998572	0.346872
H	10.613420	0.122279	-1.799966
H	8.974504	-0.364348	-2.285030
H	9.666044	-2.449623	-1.304706
H	10.765358	-1.646780	-0.179091
H	9.075999	-1.563890	1.421019



H	7.891263	-2.240022	0.280474
H	5.774837	-1.956158	-0.025020
H	4.729278	-3.391820	-0.085127
H	6.619822	-4.155559	-1.440949
H	6.835271	-2.532968	-2.143807
H	5.478619	-3.657169	-3.864365
H	4.484910	-4.443797	-2.624998
H	3.108343	-2.490886	-2.998972
H	4.529263	-1.492893	-3.417537
C	3.134010	0.566196	1.825682
C	2.597996	2.040056	-0.862347
C	2.212827	3.532198	1.802110
C	4.490161	0.370865	1.523925
C	5.252971	-0.561829	2.224665
C	4.665015	-1.331882	3.226927
C	3.318067	-1.154296	3.540482
C	2.566137	-0.207122	2.849541
H	4.960596	0.947004	0.723279
H	6.307822	-0.682304	1.980039
H	5.257317	-2.067161	3.767409
H	2.855492	-1.751441	4.323579
H	1.514938	-0.078133	3.116388
C	2.959252	3.284083	-1.397758
C	3.259116	3.427033	-2.752521
C	3.194325	2.322764	-3.597896
C	2.843436	1.074869	-3.082216
C	2.555355	0.934035	-1.727404
H	3.004802	4.159906	-0.749555
H	3.540782	4.401000	-3.146602
H	3.421915	2.430352	-4.656094
H	2.798014	0.209148	-3.741675
H	2.297324	-0.055833	-1.343989
C	3.404977	3.994295	2.377472
C	3.475225	5.255260	2.965934
C	2.348110	6.075662	2.990285
C	1.153144	5.633785	2.425065
C	1.089885	4.372048	1.836483
H	4.293001	3.360350	2.367381
H	4.408360	5.597879	3.407715
H	2.400924	7.059183	3.451885
H	0.271632	6.271019	2.444211
H	0.146926	4.040952	1.394895

TS_2SSiS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-3.802189	2.867719	2.023099
C	-2.950238	2.343261	1.038479
C	-2.228860	3.248647	0.252838



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	-2.341938	4.625611	0.432191
C	-3.182262	5.125926	1.425664
C	-3.911449	4.242622	2.221368
Si	-2.775638	0.479901	0.858446
C	-2.864644	-0.527615	2.444131
O	-4.783357	0.389699	0.725042
C	-2.605820	-0.319583	-0.827358
O	-6.164173	-1.880526	0.273045
C	-6.788129	-2.776056	1.210687
C	-7.988100	-3.342107	0.477552
C	-8.419798	-2.149247	-0.368989
C	-7.083522	-1.562742	-0.789802
O	-5.848897	1.826047	-1.254410
C	-5.781916	1.287244	-2.588988
C	-5.281908	2.425488	-3.456748
C	-5.886018	3.636630	-2.752307
C	-5.707537	3.260739	-1.293970
C	0.651674	3.161003	-1.990463
S	1.177971	2.853213	-0.263813
C	2.804371	3.616945	-0.386711
C	3.892219	2.819131	-0.736868
C	5.136448	3.456779	-0.840345
C	5.272184	4.822331	-0.599250
C	4.161413	5.587820	-0.243508
C	2.911865	4.983955	-0.134897
Si	3.678668	0.927023	-0.933668
C	4.263761	0.516500	-2.674605
Ir	1.547937	0.469587	-0.136282
P	1.726779	-1.833448	-0.505998
C	3.406730	-2.599841	-0.556586
C	4.019073	-2.979174	-1.753379
C	5.284599	-3.566599	-1.745433
C	5.941835	-3.795570	-0.540762
C	5.330699	-3.434249	0.659817
C	4.076612	-2.836780	0.650839
S	2.760164	0.456490	2.098835
C	4.490986	0.143519	1.675359
C	4.913022	0.263286	0.346753
C	6.254585	-0.027321	0.070127
C	7.136089	-0.405706	1.080819
C	6.690290	-0.502006	2.397878
C	5.357101	-0.234737	2.699639
C	2.955536	2.132552	2.805252
C	1.052877	-2.359772	-2.142159
C	0.452228	-3.609195	-2.322158
C	0.100351	-4.050975	-3.595823
C	0.343671	-3.251065	-4.708433



C	0.923089	-1.995474	-4.538554
C	1.269979	-1.552900	-3.265426
C	0.930610	-2.932624	0.736604
C	0.053068	-2.396627	1.679335
C	-0.511316	-3.212852	2.659669
C	-0.214906	-4.570837	2.697284
C	0.658024	-5.117044	1.755717
C	1.235510	-4.302316	0.789430
O	-0.240234	2.612008	2.902104
H	-5.158388	0.964882	0.004600
H	-5.238295	-0.488134	0.654105
H	-0.737627	0.659202	0.954559
H	0.827862	0.451863	-1.548597
H	-0.269039	2.600027	-2.172604
H	0.478589	4.234689	-2.112398
H	1.430655	2.812583	-2.674351
H	3.576017	0.942635	-3.415838
H	5.248962	0.971549	-2.844994
H	4.351016	-0.560849	-2.855396
H	2.033672	5.563522	0.147136
H	4.269029	6.651347	-0.045255
H	6.249962	5.291892	-0.679071
H	6.022263	2.875550	-1.099965
H	3.492304	2.775656	2.100382
H	1.950092	2.520020	2.999705
H	3.517107	2.043408	3.739071
H	4.991000	-0.331820	3.721050
H	7.374727	-0.800260	3.188571
H	8.172788	-0.631749	0.840558
H	6.620664	0.033726	-0.955424
H	3.609004	-2.572184	1.599038
H	5.833611	-3.612856	1.607719
H	6.924725	-4.261103	-0.534206
H	5.746664	-3.857224	-2.686136
H	3.508235	-2.836343	-2.704582
H	-0.187939	-1.332627	1.655693
H	-1.178842	-2.777945	3.400082
H	-0.655147	-5.204115	3.464333
H	0.901100	-6.176737	1.782219
H	1.942057	-4.736143	0.083226
H	1.722154	-0.570176	-3.147295
H	1.107460	-1.355587	-5.398655
H	0.072968	-3.599126	-5.702709
H	-0.370563	-5.024601	-3.713289
H	0.243193	-4.249126	-1.468097
H	-0.366227	1.979111	2.168735
H	-0.708851	3.405608	2.616806



H	-6.049955	-3.531814	1.503182
H	-7.087560	-2.207933	2.104816
H	-8.765655	-3.697911	1.159654
H	-7.683056	-4.178637	-0.164141
H	-9.042789	-2.422574	-1.225471
H	-8.977726	-1.430182	0.244131
H	-7.107069	-0.471671	-0.913537
H	-6.704501	-2.013917	-1.718556
H	-6.452679	3.696249	-0.619843
H	-4.702028	3.524188	-0.929289
H	-5.392281	4.580125	-3.002818
H	-6.951293	3.730071	-2.999617
H	-5.591921	2.322529	-4.500805
H	-4.184118	2.475815	-3.427652
H	-5.119921	0.409748	-2.574497
H	-6.791701	0.967660	-2.888111
H	-1.546351	2.869684	-0.503458
H	-1.765372	5.303913	-0.194976
H	-3.267100	6.199006	1.580900
H	-4.566553	4.625796	3.000592
H	-4.383268	2.193586	2.651220
C	-2.666603	-1.712968	-0.966832
C	-2.629186	-2.310650	-2.225299
C	-2.507302	-1.526695	-3.370083
C	-2.425338	-0.141203	-3.249153
C	-2.486779	0.452821	-1.990702
H	-2.743286	-2.351667	-0.085528
H	-2.687628	-3.394108	-2.310354
H	-2.464846	-1.995153	-4.350996
H	-2.328535	0.481615	-4.137485
H	-2.458733	1.541859	-1.924479
C	-3.663944	-1.676533	2.545098
C	-3.829689	-2.342054	3.757743
C	-3.197036	-1.866588	4.904337
C	-2.387338	-0.735167	4.822908
C	-2.219733	-0.077410	3.605333
H	-4.172621	-2.071274	1.665580
H	-4.454882	-3.231818	3.805054
H	-3.329968	-2.377883	5.855131
H	-1.884078	-0.359169	5.711024
H	-1.583616	0.807366	3.569614

C1_2SSiS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-3.817528	-2.571073	-1.479226
C	-3.067839	-1.419980	-1.189358
C	-1.840165	-1.244558	-1.848015
C	-1.379155	-2.181142	-2.768584



C	-2.135863	-3.319005	-3.041595
C	-3.356033	-3.513509	-2.396170
Si	-3.650175	-0.208854	0.101639
C	-3.552604	1.584673	-0.419719
C	-4.096657	2.554388	0.440349
C	-4.108877	3.903152	0.092362
C	-3.556473	4.310896	-1.123917
C	-3.011725	3.365617	-1.989383
C	-3.017705	2.014612	-1.641113
C	2.245384	-2.552825	-2.108829
C	1.682096	-3.803525	-2.378875
C	1.664213	-4.308607	-3.679201
C	2.214404	-3.574606	-4.725241
C	2.781683	-2.326732	-4.466244
C	2.789941	-1.818751	-3.171174
P	2.305432	-1.839125	-0.404911
Ir	1.787306	0.388062	-0.341632
Si	4.027430	1.219503	-0.605970
C	5.376433	0.789995	-1.871615
C	3.987023	-2.313662	0.184403
C	4.254821	-2.254730	1.558395
C	5.520979	-2.552008	2.048637
C	6.545737	-2.903188	1.170135
C	6.289521	-2.968443	-0.196453
C	5.015199	-2.681165	-0.686552
C	1.266584	-3.032604	0.547613
C	-0.072158	-2.740069	0.815239
C	-0.901117	-3.699148	1.395640
C	-0.396410	-4.950744	1.736932
C	0.945329	-5.243743	1.496334
C	1.768946	-4.293209	0.901335
S	1.098823	2.654673	-0.630620
C	2.562516	3.721508	-0.702924
C	3.827948	3.137492	-0.758367
C	4.913496	4.023545	-0.850694
C	4.736517	5.404636	-0.872514
C	3.453815	5.949105	-0.792525
C	2.354151	5.102281	-0.701553
S	2.271730	0.610917	2.080542
C	1.656149	2.219252	2.685056
C	0.580597	2.808061	-2.371921
C	4.058125	0.895253	2.258730
C	4.854769	1.093987	1.126429
C	6.233868	1.225510	1.346176
C	6.783876	1.176433	2.625766
C	5.957656	0.990818	3.733426
C	4.586103	0.839951	3.549062



O	-5.336547	-0.541765	0.284344
C	-2.962566	-0.465061	1.811598
C	-1.960860	0.381083	2.310368
C	-1.418251	0.171362	3.576011
C	-1.871251	-0.884352	4.364367
C	-2.866904	-1.734482	3.885059
C	-3.401235	-1.528426	2.615990
O	-6.628819	-1.133957	2.194254
C	-7.907372	-1.694988	1.753830
C	-8.906758	-0.594804	2.023665
C	-8.362201	0.013319	3.313318
C	-6.865738	0.013436	3.074893
O	-6.815191	0.180921	-1.672011
C	-7.415135	1.459723	-1.363868
C	-6.771590	2.444647	-2.318328
C	-6.536462	1.579419	-3.553691
C	-6.132978	0.247983	-2.947513
O	-1.101446	3.772456	1.656287
H	-5.935132	-0.309406	-0.502365
H	-5.932066	-0.835892	1.241570
H	0.152695	0.094917	-0.016490
H	1.464218	0.214222	-1.892360
H	-0.266786	2.132647	-2.517457
H	0.282718	3.842819	-2.564979
H	1.413208	2.510520	-3.014944
H	4.995605	0.950501	-2.889091
H	6.274642	1.411846	-1.756315
H	5.684221	-0.260446	-1.784421
H	1.344797	5.508871	-0.632773
H	3.311698	7.027221	-0.795708
H	5.600855	6.062107	-0.940238
H	5.927991	3.624974	-0.895174
H	2.109721	3.039288	2.117182
H	0.569159	2.234389	2.550797
H	1.900514	2.323268	3.746050
H	3.932345	0.662146	4.402958
H	6.379661	0.945438	4.734904
H	7.859122	1.277233	2.760119
H	6.901201	1.365099	0.494528
H	3.462327	-1.987892	2.258906
H	5.709345	-2.500179	3.118964
H	7.538781	-3.129120	1.551895
H	7.079960	-3.250495	-0.888618
H	4.829203	-2.750827	-1.757395
H	-0.464129	-1.754350	0.561456
H	-1.944994	-3.457878	1.586257
H	-1.044210	-5.695899	2.193460



H	1.350579	-6.216983	1.764027
H	2.808947	-4.544177	0.697049
H	3.213342	-0.834175	-2.978760
H	3.213605	-1.743145	-5.276157
H	2.199141	-3.968912	-5.738761
H	1.209451	-5.278372	-3.870101
H	1.229947	-4.390479	-1.581873
H	-0.542680	3.592440	0.883043
H	-1.994489	3.864640	1.299065
H	-8.089974	-2.591330	2.355536
H	-7.790102	-1.979320	0.703289
H	-9.925840	-0.977367	2.122241
H	-8.892315	0.141157	1.208583
H	-8.740037	1.019594	3.511299
H	-8.614813	-0.620979	4.171238
H	-6.251408	-0.128995	3.967066
H	-6.528266	0.909112	2.536181
H	-5.047834	0.195900	-2.763551
H	-6.428582	-0.625647	-3.536577
H	-5.762474	1.978593	-4.216656
H	-7.462526	1.474118	-4.132237
H	-7.409182	3.311817	-2.512506
H	-5.816590	2.804189	-1.911265
H	-7.224464	1.673507	-0.302690
H	-8.499080	1.377325	-1.519889
H	-1.596974	1.216760	1.709637
H	-0.643255	0.837317	3.952459
H	-1.447641	-1.045915	5.352947
H	-3.218535	-2.563526	4.495267
H	-4.166611	-2.215009	2.249649
H	-4.515693	2.254971	1.402418
H	-4.546274	4.636152	0.766963
H	-3.558802	5.363460	-1.396868
H	-2.590168	3.677560	-2.942648
H	-2.609979	1.286232	-2.342960
H	-1.203145	-0.390439	-1.611553
H	-3.948215	-4.401796	-2.604675
H	-4.774239	-2.738620	-0.983778
H	-0.417342	-2.030178	-3.257966
H	-1.772192	-4.056287	-3.754715

TS_2SGeS_Et₃SiH Número de átomos: 126

Ir	1.159814	-0.469967	-0.140860
Si	-3.001265	-0.944458	-1.115692
H	-1.021686	-0.684185	-1.231951
O	-0.269174	-1.214512	-3.768821
H	-0.691235	-2.050485	-3.994818



H	-0.490199	-1.060509	-2.828180
C	2.944699	-1.241252	-3.189978
H	3.437269	-2.008776	-2.584069
H	3.606963	-0.916023	-3.996661
H	1.997695	-1.603474	-3.601485
H	0.399761	-0.885090	1.188921
C	3.749082	-0.623787	2.756603
H	3.710535	0.417821	3.091404
H	3.038350	-1.222412	3.337110
H	4.756699	-1.015693	2.938262
Ge	3.320123	-0.792617	0.852939
C	3.781402	-2.652192	0.338503
C	2.859297	-3.448897	-0.335834
S	1.192661	-2.824584	-0.654698
C	0.344595	-3.641530	0.740612
H	-0.685677	-3.276035	0.754016
H	0.358920	-4.722550	0.574768
H	0.848901	-3.379793	1.675183
H	2.423988	-5.323177	-1.323658
C	3.166255	-4.733840	-0.786865
C	4.435778	-5.249088	-0.542531
H	4.689650	-6.248363	-0.887472
C	5.379245	-4.477221	0.135589
H	6.374373	-4.875315	0.320673
C	5.052034	-3.192984	0.564589
H	5.807773	-2.597895	1.079278
C	4.186671	0.604048	-1.542347
C	4.567487	0.264108	-0.242197
S	2.529398	0.210133	-2.162444
C	5.840125	0.651518	0.185925
H	6.160174	0.419838	1.202589
C	6.709027	1.338440	-0.659893
H	7.694246	1.633459	-0.305186
C	6.313068	1.651499	-1.959015
H	6.984967	2.189693	-2.623449
C	5.042556	1.292159	-2.402552
H	4.714187	1.557335	-3.406946
P	0.874946	1.698536	0.620645
C	0.033873	2.865433	-0.526711
C	0.063751	4.247458	-0.289634
H	0.600055	4.644020	0.571915
C	-0.589113	5.122394	-1.150544
H	-0.561054	6.191858	-0.955632
C	-1.272809	4.629297	-2.262784
H	-1.777127	5.315503	-2.939199
C	-1.302702	3.259844	-2.506891
H	-1.828672	2.869932	-3.376087



C	-0.650742	2.381439	-1.641988
H	-0.672562	1.306447	-1.824991
C	2.383169	2.670885	1.039960
C	2.812466	2.868604	2.354051
H	2.229876	2.483321	3.189064
C	3.985483	3.577196	2.615197
H	4.305591	3.723510	3.644330
C	4.732643	4.105025	1.566757
H	5.644440	4.661358	1.771317
C	4.303361	3.924314	0.252340
H	4.878434	4.334904	-0.574680
C	3.141075	3.209057	-0.008718
H	2.815644	3.085070	-1.041657
C	-0.128563	1.777128	2.165228
C	0.208476	0.936667	3.234841
H	1.027516	0.226188	3.130703
C	-0.498762	0.989610	4.430955
H	-0.214965	0.337325	5.253525
C	-1.209794	2.650274	2.311542
H	-1.508406	3.300928	1.492412
C	-1.934177	2.686540	3.503016
H	-2.779934	3.364200	3.594822
C	-1.576030	1.864571	4.567383
H	-2.137388	1.899019	5.498162
C	-3.296777	0.041895	-2.701519
H	-2.344873	0.462046	-3.045652
H	-3.921788	0.901509	-2.407054
C	-3.951728	-0.730227	-3.845927
H	-4.893942	-1.205604	-3.545987
H	-4.170738	-0.071797	-4.695595
H	-3.293708	-1.525385	-4.218579
H	-1.672156	-3.018834	-1.345454
C	-2.747884	-2.818236	-1.257401
H	-3.183038	-3.085561	-2.233503
C	-3.361855	-3.707699	-0.177441
H	-2.989431	-3.461636	0.826052
H	-4.454760	-3.620341	-0.151499
H	-3.129501	-4.764398	-0.358719
C	-2.994771	0.061531	0.481333
H	-2.233740	0.844773	0.365466
H	-3.962791	0.586029	0.545830
C	-2.731972	-0.734348	1.756238
H	-1.765958	-1.256527	1.704438
H	-3.515053	-1.485058	1.931548
H	-2.695210	-0.080006	2.638534
O	-5.000023	-1.263826	-0.973257
H	-5.339959	-1.496686	-0.073630



H	-5.518300	-0.469102	-1.266660
O	-6.027282	-1.728926	1.502522
C	-6.183159	-0.647840	2.439970
H	-7.177484	-0.197875	2.297753
H	-5.420367	0.111826	2.224075
H	-5.001537	-1.374836	4.098436
C	-6.057732	-1.281961	3.811761
H	-6.573420	-0.706179	4.585706
H	-7.762029	-2.593954	3.542920
H	-6.383424	-3.403380	4.315814
C	-6.666694	-2.659167	3.565986
C	-6.124084	-2.991159	2.188929
H	-5.118560	-3.436247	2.251785
H	-6.765353	-3.655232	1.599561
O	-6.342968	0.972512	-1.543688
H	-7.505907	0.254877	0.011176
C	-7.344949	1.195991	-0.532802
H	-6.959120	1.946974	0.171500
C	-6.820485	1.435385	-2.819628
H	-5.982348	1.908747	-3.342950
H	-7.165616	0.573007	-3.410012
C	-7.963084	2.374126	-2.489101
H	-7.576757	3.364744	-2.217137
H	-8.662070	2.493624	-3.321906
C	-8.577570	1.686089	-1.273937
H	-9.197399	0.838105	-1.591691
H	-9.195304	2.348605	-0.660949

CO_2SGeS_Me_2PhSiH Número de átomos: 124

C	3.899979	3.272284	1.209053
C	4.132208	2.536869	0.036439
C	5.202315	2.922338	-0.783616
C	6.013071	4.004643	-0.443200
C	5.771816	4.715835	0.730950
C	4.711080	4.349370	1.559273
Si	3.089264	1.017659	-0.321022
C	3.049454	0.587553	-2.141160
C	3.658293	-0.388504	0.788511
O	4.616099	-2.240057	-1.728563
C	4.590509	-2.813539	-3.034074
C	5.961819	-3.456706	-3.207603
C	6.371876	-3.817486	-1.764857
C	5.257541	-3.214711	-0.904135
O	6.517493	-0.126014	-1.642650
O	7.108842	-0.446798	1.121327
C	7.118419	0.875350	1.672748
C	8.460465	1.440677	1.258541



C	9.365018	0.228455	1.469524
C	8.460641	-0.939742	1.074120
C	1.358025	-2.941420	-1.119650
C	0.438940	-2.261680	-0.325793
C	-0.891286	-2.687692	-0.235402
C	-1.279171	-3.833914	-0.937610
C	-0.362432	-4.516413	-1.734327
C	0.952593	-4.069196	-1.832042
P	-1.997868	-1.744372	0.894031
C	-3.675562	-2.419147	0.597311
C	-4.510235	-2.718855	1.678844
C	-5.812493	-3.162800	1.460080
C	-6.291898	-3.315151	0.160892
C	-5.468330	-3.009700	-0.921397
C	-4.170078	-2.557411	-0.705489
Ir	-1.789193	0.558487	0.862917
S	-1.596237	2.937456	1.194273
C	-2.748607	3.755202	0.070616
C	-3.671837	2.999673	-0.649790
C	-4.510660	3.683778	-1.536274
C	-4.428948	5.065967	-1.688121
C	-3.495883	5.795770	-0.951472
C	-2.642801	5.139895	-0.068670
Ge	-3.736757	1.031133	-0.446431
C	-5.571111	0.610197	0.078168
C	-3.288973	0.302995	-2.225000
C	-1.939351	0.089276	-2.525483
C	-1.530621	-0.518442	-3.712072
C	-2.493503	-0.915169	-4.638381
C	-3.843814	-0.689496	-4.375711
C	-4.232329	-0.086512	-3.179672
S	-0.641391	0.607655	-1.374781
C	-0.372934	2.300813	-2.009995
C	-2.409193	3.290767	2.787501
C	-1.544325	-2.461551	2.531985
C	-1.184618	-3.813206	2.617463
C	-0.894429	-4.389866	3.849477
C	-0.953487	-3.623758	5.012948
C	-1.309007	-2.280165	4.938502
C	-1.605952	-1.701627	3.705131
O	0.218635	0.531820	2.201465
H	4.061847	0.355958	-2.493191
H	-0.470333	-0.685068	-3.903748
H	-2.187600	-1.399843	-5.562212
H	-4.595830	-0.995486	-5.099594
H	-5.294412	0.058128	-2.976854
H	-5.239304	3.125024	-2.126137



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	-5.088000	5.576609	-2.386447
H	-3.424903	6.873964	-1.070871
H	-1.899899	5.697550	0.499844
H	-5.699418	0.896664	1.127783
H	-6.268962	1.195332	-0.531895
H	-5.797123	-0.453802	-0.034805
H	-1.844230	2.755564	3.555457
H	-2.369397	4.367885	2.971121
H	-3.442123	2.933556	2.756574
H	0.351059	2.792133	-1.351686
H	0.041109	2.218491	-3.019000
H	-1.310134	2.865038	-2.031814
H	-4.146481	-2.610571	2.699771
H	-6.450966	-3.394310	2.309133
H	-7.306414	-3.667674	-0.008258
H	-5.835792	-3.115506	-1.940075
H	-3.547771	-2.306810	-1.563844
H	-2.295724	-4.212338	-0.860373
H	-0.679820	-5.404554	-2.275351
H	1.662549	-4.605978	-2.457954
H	2.388460	-2.586663	-1.186376
H	0.765405	-1.385470	0.234669
H	-1.896884	-0.653542	3.656774
H	-1.359848	-1.676102	5.841184
H	-0.722195	-4.074799	5.974870
H	-0.619054	-5.440508	3.899815
H	-1.131169	-4.424641	1.718043
H	-2.676480	0.500715	2.189866
H	1.697869	1.386495	0.122052
H	4.699148	-0.652764	0.561980
H	3.050158	-1.296031	0.676121
H	2.417214	-0.292285	-2.320299
H	2.661356	1.424802	-2.734006
H	5.833441	-0.807109	-1.770430
H	6.707803	-0.168567	-0.687702
H	0.447465	-0.276560	2.680834
H	1.001734	0.788056	1.688644
H	6.251937	1.413702	1.267833
H	7.025159	0.822941	2.769867
H	8.757762	2.317008	1.843160
H	8.429685	1.727335	0.197373
H	10.283217	0.261381	0.875739
H	9.651031	0.153155	2.526097
H	8.554483	-1.799423	1.749588
H	8.649068	-1.285259	0.047700
H	5.611183	-2.705611	0.000503
H	4.513775	-3.975884	-0.610805



H	6.452235	-4.897922	-1.609564
H	7.342116	-3.374976	-1.513883
H	6.664889	-2.736155	-3.640052
H	5.925361	-4.325566	-3.871778
H	3.785700	-3.568134	-3.082621
H	4.364171	-2.015086	-3.748519
H	3.625986	-0.074493	1.841340
H	5.423606	2.353130	-1.686519
H	6.841179	4.286414	-1.090589
H	6.407490	5.556863	0.999686
H	4.516548	4.904584	2.474548
H	3.071847	2.999095	1.867366

TS_2SGeS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

C	-1.973975	-4.911830	-1.161721
C	-1.988839	-3.517699	-1.099810
C	-3.088222	-2.761141	-1.498476
C	-4.199309	-3.455307	-1.990070
C	-4.204444	-4.845810	-2.075643
C	-3.092103	-5.576231	-1.657266
S	-0.493567	-2.691511	-0.503605
C	0.417099	-2.722599	-2.087983
Ge	-3.089172	-0.795298	-1.235823
C	-4.486839	-0.557013	0.134013
C	-5.838274	-0.355618	-0.161817
C	-6.782907	-0.188497	0.848978
C	-6.386078	-0.216981	2.185262
C	-5.045534	-0.416850	2.505819
C	-4.115232	-0.589970	1.480027
S	-2.388445	-0.824180	1.968964
C	-2.444315	-2.611059	2.339431
Ir	-1.013584	-0.372221	-0.110512
P	-1.191674	1.931688	0.004247
C	0.158911	2.754513	-0.945187
C	1.012410	3.688951	-0.351591
C	2.030258	4.289525	-1.093605
C	2.193307	3.979637	-2.440124
C	1.341258	3.054029	-3.043611
C	0.342116	2.438266	-2.298348
C	-1.054595	2.690294	1.672634
C	-1.532857	3.983626	1.923578
C	-1.351560	4.569655	3.172109
C	-0.691004	3.871684	4.183638
C	-0.210031	2.588315	3.940376
C	-0.391605	2.000897	2.690011
C	-2.721909	2.731522	-0.638791
C	-3.902865	2.595157	0.102640



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	-5.090151	3.164723	-0.344835
C	-5.116971	3.876188	-1.543525
C	-3.947109	4.023326	-2.283517
C	-2.755226	3.457310	-1.833128
C	-3.627763	0.058528	-2.911983
O	0.526326	-1.763315	3.158075
C	3.043326	-2.852007	0.568740
C	3.390279	-1.771834	1.387302
C	3.885163	-2.051488	2.670032
C	3.999818	-3.364283	3.127320
C	3.632637	-4.426023	2.299310
C	3.161680	-4.167644	1.012954
Si	3.166582	0.004458	0.824546
O	5.125465	0.250406	0.796868
C	2.988142	1.344956	2.120597
C	2.986987	0.373451	-1.004281
O	5.315697	2.655386	-0.258387
C	5.593438	2.629927	-1.669094
C	6.378300	3.898549	-1.951252
C	5.823011	4.853285	-0.897301
C	5.660625	3.934568	0.298910
O	6.414783	-1.636053	-0.579587
C	6.746506	-2.778913	0.234770
C	6.854511	-3.944343	-0.731148
C	5.841951	-3.562875	-1.807521
C	6.032234	-2.059706	-1.899067
H	1.187816	-0.255244	0.955070
H	0.772950	-1.295861	2.335502
H	1.299533	-2.301471	3.368578
H	3.950750	1.778344	2.415542
H	2.500068	0.939478	3.015422
H	2.343866	2.144101	1.733040
H	2.103499	-0.107100	-1.434357
H	3.880831	0.086380	-1.573044
H	2.850965	1.458241	-1.123414
H	4.178454	-1.232493	3.328576
H	4.377124	-3.559427	4.128813
H	3.717793	-5.450254	2.654831
H	2.881866	-4.989624	0.355737
H	2.673448	-2.665793	-0.440182
H	5.629911	-0.414261	0.254887
H	5.353199	1.162393	0.477276
H	7.675912	-2.557186	0.769514
H	5.940495	-2.930079	0.968946
H	6.633274	-4.901734	-0.248807
H	7.864257	-3.999781	-1.157441
H	4.823901	-3.801293	-1.473167



H	6.015364	-4.062378	-2.765254
H	6.837613	-1.792706	-2.597953
H	5.124778	-1.513533	-2.189036
H	4.633633	2.613595	-2.210261
H	6.139050	1.703089	-1.896030
H	7.450714	3.733343	-1.787858
H	6.239876	4.253677	-2.976872
H	6.481350	5.700996	-0.686967
H	4.848215	5.249688	-1.214091
H	6.599512	3.836875	0.863090
H	4.863767	4.229826	0.991346
H	-0.000592	1.003639	2.496725
H	-0.553015	4.330298	5.160050
H	-1.725968	5.574013	3.355548
H	-2.041994	4.541693	1.138901
H	0.307999	2.036766	4.722300
H	-3.900405	2.050974	1.046849
H	-5.995756	3.049377	0.246775
H	-6.045513	4.320261	-1.894268
H	-3.955259	4.585180	-3.214558
H	-1.851234	3.597154	-2.420941
H	0.895624	3.954028	0.697815
H	2.689915	5.008948	-0.611217
H	2.980175	4.457092	-3.021964
H	1.461808	2.803310	-4.094942
H	-0.300458	1.698407	-2.775298
H	-2.765341	0.098220	-3.586259
H	-3.983047	1.077933	-2.727283
H	-4.424541	-0.520540	-3.392605
H	-6.162024	-0.309002	-1.202624
H	-7.828241	-0.025531	0.595674
H	-7.116437	-0.076214	2.978384
H	-4.722219	-0.428681	3.545934
H	-3.113787	-2.764679	3.190116
H	-1.422955	-2.896109	2.607636
H	-2.804432	-3.173094	1.471639
H	-1.100979	-5.470241	-0.826157
H	-3.096246	-6.662041	-1.712199
H	-5.080409	-5.363676	-2.459698
H	-5.083897	-2.901303	-2.307526
H	-0.209946	-2.292302	-2.874034
H	0.681728	-3.758772	-2.319554
H	1.316615	-2.114922	-1.965846
H	-0.272016	-0.088476	-1.488430

C1_2SGeS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

C	2.894089	2.815304	-2.025804
---	----------	----------	-----------



C	3.342455	2.036247	-0.949430
C	3.727332	2.692847	0.230740
C	3.677898	4.080986	0.329576
C	3.225395	4.837498	-0.750910
C	2.828046	4.204135	-1.926939
Si	3.481589	0.184972	-1.101444
C	2.817935	-0.762589	0.345372
C	3.089513	-0.479938	-2.783943
O	5.245235	-0.033058	-0.998582
O	6.630074	-2.099364	-1.224512
C	6.829358	-2.606258	0.118230
C	8.194611	-2.095481	0.528698
C	8.953784	-2.176746	-0.792340
C	7.910728	-1.706485	-1.788669
O	6.540627	0.961909	0.941686
C	7.395552	2.089415	0.643867
C	7.596701	2.781193	1.977076
C	7.555478	1.604308	2.947693
C	6.432903	0.769011	2.367111
O	0.135692	1.254999	-3.628762
C	0.051430	3.330875	0.610941
S	-1.199718	2.717360	-0.563837
C	-2.659708	3.524833	0.153701
C	-3.567797	2.795738	0.917900
C	-4.653364	3.503704	1.450815
C	-4.821391	4.867563	1.225214
C	-3.900302	5.563991	0.441685
C	-2.813868	4.889263	-0.105358
Ge	-3.333446	0.820546	1.135696
C	-3.839553	0.471612	3.011509
Ir	-1.305353	0.343145	-0.196860
S	-2.961653	-0.051872	-2.037397
C	-3.206499	1.463453	-3.025868
P	-1.175699	-1.883348	0.323617
C	-0.086913	-2.233190	1.772900
C	0.802346	-3.310480	1.808741
C	1.595445	-3.539122	2.932999
C	1.501596	-2.700523	4.039799
C	0.612136	-1.626666	4.016806
C	-0.169576	-1.391985	2.890444
C	-2.749079	-2.726847	0.789439
C	-3.664861	-3.050591	-0.220211
C	-4.881866	-3.646208	0.090358
C	-5.209583	-3.916190	1.418700
C	-4.307419	-3.596691	2.429425
C	-3.081470	-3.009627	2.116403
C	-0.563707	-3.039006	-0.981931



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	0.113814	-2.550872	-2.100211
C	0.587397	-3.420734	-3.082017
C	0.386769	-4.791860	-2.955281
C	-0.293506	-5.291676	-1.844360
C	-0.769398	-4.422214	-0.868526
C	-4.625533	-0.164813	-1.307740
C	-4.849891	0.154838	0.031545
C	-6.154279	-0.006083	0.513398
C	-7.188003	-0.457345	-0.305134
C	-6.933477	-0.763040	-1.641561
C	-5.643462	-0.623751	-2.145526
H	5.715190	0.391690	-0.202428
H	5.718959	-0.934686	-1.179224
H	0.085222	0.234448	-1.155986
H	1.737984	-0.589102	0.438486
H	2.981236	-1.838978	0.203429
H	2.067823	-0.216885	-3.086814
H	3.185873	-1.572443	-2.792131
H	-0.284380	0.580997	0.996356
H	0.999413	2.850675	0.348031
H	0.136558	4.416433	0.507041
H	-0.243879	3.054455	1.626748
H	-3.057377	0.847309	3.680569
H	-4.779680	0.975680	3.266705
H	-3.965057	-0.604035	3.180428
H	-2.092266	5.418950	-0.726903
H	-4.030870	6.626821	0.252136
H	-5.676617	5.388964	1.650242
H	-5.394616	2.975435	2.052322
H	-3.485632	2.300845	-2.377767
H	-2.262667	1.665178	-3.539890
H	-3.996665	1.280089	-3.758652
H	-5.427188	-0.885165	-3.181360
H	-7.731806	-1.123084	-2.286607
H	-8.191452	-0.576133	0.098958
H	-6.370872	0.219359	1.558553
H	-3.422084	-2.851444	-1.264548
H	-5.578474	-3.892875	-0.708033
H	-6.163733	-4.377556	1.662819
H	-4.550588	-3.809889	3.468147
H	-2.383134	-2.779562	2.919593
H	0.256979	-1.475882	-2.201773
H	1.103471	-3.020233	-3.952467
H	0.750489	-5.471416	-3.722637
H	-0.459901	-6.361436	-1.740427
H	-1.308486	-4.826275	-0.012162
H	-0.845966	-0.538782	2.870352



H	0.529270	-0.965886	4.876774
H	2.118563	-2.880859	4.917188
H	2.289347	-4.376917	2.938133
H	0.900438	-3.972974	0.951477
H	-0.016127	0.968937	-2.705400
H	0.157764	2.217788	-3.588266
H	6.794024	-3.702472	0.080264
H	5.995250	-2.251049	0.737430
H	8.642465	-2.692402	1.328026
H	8.125510	-1.050267	0.866471
H	9.853835	-1.556070	-0.816927
H	9.247044	-3.213000	-1.000737
H	7.995482	-2.157061	-2.781299
H	7.910910	-0.610912	-1.892654
H	5.447098	1.125774	2.701326
H	6.510376	-0.304342	2.574834
H	7.364440	1.896760	3.983728
H	8.501605	1.047589	2.914539
H	8.530600	3.348334	2.015645
H	6.765454	3.470328	2.178592
H	6.895694	2.703147	-0.114707
H	8.338773	1.702059	0.231628
H	3.296169	-0.462338	1.287447
H	3.777666	-0.062659	-3.528640
H	4.078097	2.118145	1.090123
H	3.986543	4.571650	1.250222
H	3.180594	5.921530	-0.674541
H	2.473613	4.792434	-2.770489
H	2.589087	2.331727	-2.954222

CO_2SGeS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-2.133986	6.017656	-0.259743
C	-2.902574	4.846072	-0.234708
C	-4.283577	4.952502	-0.461395
C	-4.877088	6.188887	-0.701759
C	-4.095295	7.343960	-0.722503
C	-2.722295	7.258282	-0.502219
Si	-2.121730	3.186771	0.151130
C	-2.444911	2.676727	1.925614
C	-3.701746	2.218968	2.351851
C	-3.947717	1.958514	3.698640
C	-2.937816	2.140670	4.643199
C	-1.681238	2.586669	4.238116
C	-1.442210	2.852477	2.891206
C	-2.721634	1.907429	-1.092204
C	-2.900137	0.557144	-0.756422
C	-3.179197	-0.393202	-1.738252



C	-3.328224	-0.004959	-3.069232
C	-3.196121	1.338116	-3.417490
C	-2.886144	2.279224	-2.437742
O	-6.710256	-1.401537	-2.222548
C	-8.090705	-1.714744	-1.970957
C	-8.079741	-3.033583	-1.219413
C	-6.868116	-3.720725	-1.840515
C	-5.903909	-2.555410	-1.965805
O	-6.197924	0.267983	0.034798
C	-3.883767	-2.494730	1.440690
O	-4.331494	-1.165890	1.689113
C	-5.172276	-1.265000	2.835106
C	-6.003709	-2.520099	2.599092
C	-5.071279	-3.410857	1.754096
S	1.688503	1.315205	1.025744
Ir	2.088331	-0.070886	-1.039059
P	1.227562	-2.025744	-0.140878
C	2.405542	-3.415738	0.062058
C	2.518674	-4.394334	-0.930057
C	3.464862	-5.410585	-0.811598
C	4.301863	-5.463576	0.300482
C	4.198577	-4.488320	1.290967
C	3.263050	-3.465658	1.168313
C	2.830189	0.598048	2.235829
C	3.981451	-0.083142	1.821794
C	4.813690	-0.604065	2.816599
C	4.503585	-0.462175	4.169075
C	3.347061	0.213650	4.552837
C	2.504043	0.751428	3.582426
Ge	4.285008	-0.285316	-0.119009
C	5.167070	1.397530	-0.678300
C	4.558893	2.234629	-1.611564
C	5.130598	3.440165	-2.021105
C	6.359567	3.818296	-1.488347
C	6.994004	2.999527	-0.553770
C	6.399510	1.804210	-0.155591
S	2.944866	1.800680	-2.293732
C	3.453652	1.127884	-3.910145
C	2.380335	3.004277	0.931296
C	5.572824	-1.685473	-0.575451
C	-0.085648	-2.735258	-1.227323
C	-1.104138	-3.525259	-0.680510
C	-2.092030	-4.069789	-1.497191
C	-2.073872	-3.835192	-2.871202
C	-1.055550	-3.064432	-3.426715
C	-0.066070	-2.519028	-2.610726
C	0.350462	-1.899500	1.470679



C	-0.568760	-0.852452	1.592614
C	-1.308103	-0.680160	2.756859
C	-1.125504	-1.550873	3.828507
C	-0.233607	-2.614704	3.710736
C	0.492810	-2.797338	2.534619
O	0.071517	0.574192	-2.172878
H	1.590453	1.273026	3.867336
H	3.095522	0.317767	5.605396
H	5.161234	-0.885853	4.924710
H	5.714899	-1.149137	2.531685
H	6.903051	1.176215	0.581405
H	7.950189	3.299173	-0.130975
H	6.816940	4.755086	-1.796668
H	4.619605	4.079365	-2.739702
H	5.968268	-1.446014	-1.568768
H	6.404784	-1.687561	0.139055
H	5.117354	-2.678387	-0.598080
H	2.549682	0.737747	-4.385601
H	3.878668	1.935832	-4.511738
H	4.180145	0.325191	-3.756962
H	1.837369	3.537399	0.143920
H	2.204855	3.493943	1.893730
H	3.451084	2.982570	0.707940
H	1.867037	-4.371961	-1.801983
H	3.541947	-6.165548	-1.590209
H	5.035222	-6.260790	0.393884
H	4.853627	-4.513809	2.159293
H	3.210498	-2.700301	1.941725
H	1.161668	-3.650353	2.455408
H	-0.103677	-3.314078	4.533336
H	-1.693318	-1.408258	4.746370
H	-2.034571	0.127075	2.818494
H	-0.718072	-0.165743	0.760306
H	0.732358	-1.925435	-3.054464
H	-1.029388	-2.882022	-4.498436
H	-2.849430	-4.255861	-3.507474
H	-2.881379	-4.677769	-1.056154
H	-1.132747	-3.715471	0.391615
H	2.471000	-1.018933	-2.267240
H	-0.639234	3.341021	0.005909
H	-5.460510	-0.200591	0.461970
H	-6.292257	-0.151302	-0.839061
H	-0.638552	-0.086462	-2.229472
H	-0.367140	1.374713	-1.846299
H	-8.534523	-0.885816	-1.407280
H	-8.614313	-1.804085	-2.934252
H	-9.012607	-3.593708	-1.332577



H	-7.910797	-2.859046	-0.146798
H	-6.463540	-4.539818	-1.235603
H	-7.120339	-4.121132	-2.830995
H	-5.172165	-2.662278	-2.776699
H	-5.352593	-2.401236	-1.018993
H	-3.533146	-2.539806	0.401938
H	-3.025890	-2.714429	2.099885
H	-4.746480	-4.306385	2.293491
H	-5.571274	-3.747607	0.837038
H	-6.909705	-2.263161	2.037186
H	-6.314985	-2.993174	3.535391
H	-4.544725	-1.352461	3.739861
H	-5.759949	-0.343099	2.901698
H	-2.831992	0.235940	0.284374
H	-3.284777	-1.444108	-1.466121
H	-3.552998	-0.749658	-3.830918
H	-3.324456	1.650039	-4.451269
H	-2.768906	3.324282	-2.727133
H	-4.503201	2.062264	1.626627
H	-4.930850	1.616061	4.015470
H	-3.132097	1.936838	5.694067
H	-0.888756	2.726871	4.970577
H	-0.452393	3.197067	2.586185
H	-4.907148	4.056340	-0.457107
H	-5.949023	6.252396	-0.875837
H	-4.557234	8.310302	-0.912603
H	-2.109529	8.157054	-0.520854
H	-1.058074	5.963122	-0.089965

TS_2SGeS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-2.622299	-1.096039	3.479394
C	-3.031204	-1.351644	2.162290
C	-3.640384	-2.586350	1.888566
C	-3.858431	-3.521672	2.897876
C	-3.485358	-3.232895	4.209043
C	-2.860563	-2.020544	4.495689
Si	-2.944671	-0.019103	0.843179
C	-2.717665	-0.448147	-0.962705
C	-2.102472	-1.641191	-1.359938
C	-1.977774	-1.964317	-2.708446
C	-2.431873	-1.082157	-3.688254
C	-3.038193	0.114638	-3.311954
C	-3.191279	0.414683	-1.959348
C	-3.196332	1.763613	1.380673
C	-3.807769	2.046837	2.612158
C	-3.960010	3.359699	3.057067
C	-3.518377	4.421659	2.267862



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	-2.937814	4.161474	1.028288
C	-2.780933	2.845994	0.597105
O	-4.956791	-0.184714	0.642672
C	0.969364	-3.935514	-1.983025
C	1.402127	-2.609220	-1.892648
C	1.500473	-1.851694	-3.065655
C	1.204242	-2.413950	-4.303150
C	0.784833	-3.740808	-4.385415
C	0.657914	-4.495293	-3.221882
P	1.977196	-1.875045	-0.300835
C	1.392063	-3.047666	0.991580
C	0.337929	-2.703149	1.843264
C	-0.102562	-3.606560	2.810058
C	0.498637	-4.854521	2.935175
C	1.550090	-5.205806	2.089674
C	1.995378	-4.307683	1.127585
Ir	1.382892	0.355376	-0.059492
S	2.682111	0.720384	2.072584
C	2.537658	2.439739	2.681838
S	0.557113	2.609998	-0.239755
C	1.958912	3.704023	-0.544396
C	3.174555	3.164124	-0.954083
C	4.225454	4.056581	-1.189539
C	4.057818	5.429889	-1.019653
C	2.828355	5.939845	-0.602168
C	1.766352	5.073118	-0.359108
Ge	3.404188	1.195106	-1.055967
C	4.816581	0.896154	0.278801
C	4.434680	0.762817	1.615181
C	5.372164	0.638857	2.639473
C	6.729188	0.649119	2.325801
C	7.134474	0.763432	0.997299
C	6.182613	0.884642	-0.013606
C	-0.181272	2.704472	-1.912399
C	4.048855	0.803432	-2.863109
C	3.777982	-2.278634	-0.337762
C	4.452168	-2.579995	-1.523627
C	5.816965	-2.867727	-1.508621
C	6.517599	-2.872014	-0.306875
C	5.850161	-2.583975	0.883394
C	4.493854	-2.282923	0.866899
O	-5.756268	-2.364368	-0.670626
C	-6.909482	-2.871492	0.036809
C	-8.107564	-2.635449	-0.878155
C	-7.601764	-1.538998	-1.813464
C	-6.155229	-1.950489	-1.986133
O	-0.506981	1.637507	3.249160



O	-6.449282	1.732046	-0.537317
C	-6.434698	1.991103	-1.946798
C	-5.857367	3.385838	-2.069641
C	-6.512646	4.081901	-0.878126
C	-6.564672	2.981101	0.177146
H	-5.451476	0.564164	0.219434
H	-5.228881	-1.013970	0.166393
H	-0.913332	0.181499	1.011411
H	0.626250	0.110319	-1.434032
H	-0.979800	1.958557	-1.966066
H	-0.578554	3.714250	-2.062411
H	0.584007	2.473056	-2.659222
H	3.254992	1.020981	-3.586129
H	4.900111	1.459625	-3.080001
H	4.367961	-0.237932	-2.969706
H	0.800937	5.452766	-0.025013
H	2.698460	7.009833	-0.459496
H	4.890495	6.105456	-1.202194
H	5.199304	3.674715	-1.499446
H	2.874143	3.141155	1.911671
H	1.485225	2.598984	2.935340
H	3.159737	2.535192	3.575764
H	5.044938	0.523202	3.672125
H	7.467543	0.551259	3.118162
H	8.193614	0.753805	0.748946
H	6.513704	0.965201	-1.049819
H	3.986358	-2.068147	1.807378
H	6.388661	-2.587744	1.828404
H	7.580258	-3.103313	-0.294606
H	6.325840	-3.101637	-2.441041
H	3.916901	-2.609397	-2.471145
H	-0.148507	-1.727030	1.761700
H	-0.918888	-3.323390	3.469721
H	0.152196	-5.553252	3.693340
H	2.027856	-6.178537	2.181037
H	2.824219	-4.590540	0.480054
H	1.807682	-0.808485	-3.011962
H	1.294702	-1.810336	-5.203508
H	0.547911	-4.180846	-5.351291
H	0.316385	-5.526610	-3.272622
H	0.863949	-4.544401	-1.088053
H	-0.611736	1.142623	2.410944
H	-1.233585	2.273031	3.248114
H	-6.740490	-3.928572	0.273770
H	-6.987594	-2.312455	0.980141
H	-9.004092	-2.351661	-0.319579
H	-8.339917	-3.541441	-1.451485



H	-8.150390	-1.485065	-2.758492
H	-7.652937	-0.554982	-1.321227
H	-5.472068	-1.149342	-2.299681
H	-6.047335	-2.794182	-2.684665
H	-7.500509	2.976212	0.747655
H	-5.724257	3.037634	0.882806
H	-5.957085	4.958043	-0.529313
H	-7.525063	4.408696	-1.145391
H	-6.086362	3.858300	-3.029331
H	-4.763853	3.359719	-1.950221
H	-5.843766	1.202793	-2.429975
H	-7.463290	1.948307	-2.339114
H	-2.320099	2.666315	-0.369357
H	-2.596875	4.981446	0.397593
H	-3.631552	5.445640	2.616023
H	-4.427194	3.553250	4.020050
H	-4.167870	1.231115	3.239371
H	-1.711708	-2.331389	-0.609167
H	-1.505250	-2.901694	-2.996581
H	-2.311736	-1.329760	-4.741151
H	-3.401865	0.811613	-4.066192
H	-3.690052	1.343231	-1.679449
H	-3.968356	-2.825941	0.876099
H	-4.331390	-4.472429	2.660016
H	-3.671351	-3.953519	5.002422
H	-2.549580	-1.793599	5.513321
H	-2.108684	-0.166140	3.724611

C1_2SGeS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-6.324510	-0.192774	-2.969890
O	-6.967010	-0.210796	-1.672414
C	-7.626488	1.052582	-1.429926
C	-7.057407	2.004351	-2.462103
C	-6.815305	1.073274	-3.647110
O	-5.369624	-0.675997	0.266266
Si	-3.703812	-0.301118	-0.016587
C	-2.990182	-0.436692	1.696475
C	-2.141153	0.539948	2.236042
C	-1.619850	0.395388	3.520215
C	-1.933307	-0.729624	4.280613
C	-2.772280	-1.712405	3.757547
C	-3.292750	-1.564196	2.475289
C	-3.106674	-1.598620	-1.211503
C	-3.807007	-2.804451	-1.373220
C	-3.307242	-3.817737	-2.189183
C	-2.096167	-3.642251	-2.856912
C	-1.389840	-2.449719	-2.713174



C	-1.891361	-1.440191	-1.897077
C	-3.677144	1.443901	-0.689646
C	-4.247959	2.471876	0.079787
C	-4.311718	3.780412	-0.392786
C	-3.783484	4.091231	-1.647423
C	-3.214617	3.087234	-2.427234
C	-3.171430	1.775877	-1.954001
C	2.243718	-2.700326	-1.954299
C	1.736754	-3.980868	-2.194167
C	1.787501	-4.537035	-3.472687
C	2.352717	-3.824910	-4.525774
C	2.865799	-2.548102	-4.296162
C	2.804561	-1.989088	-3.023845
P	2.196284	-1.914147	-0.281817
C	1.181300	-3.124408	0.672122
C	-0.191487	-2.916996	0.822583
C	-0.996211	-3.909850	1.379462
C	-0.435927	-5.106007	1.818577
C	0.938200	-5.309892	1.699579
C	1.739296	-4.329183	1.123084
Ir	1.575227	0.279075	-0.352917
S	2.005267	0.697368	2.059991
C	3.773673	1.045776	2.305306
C	4.625933	1.224630	1.214718
C	5.980845	1.433101	1.498664
C	6.459924	1.470757	2.807158
C	5.581034	1.297374	3.875458
C	4.229691	1.076024	3.623993
Ge	3.868579	1.202240	-0.633599
C	3.533840	3.168735	-0.860496
C	2.229369	3.656649	-0.869286
C	1.925925	5.019335	-0.916706
C	2.966424	5.939796	-0.989031
C	4.286390	5.487073	-1.003085
C	4.557743	4.122512	-0.934898
S	0.824995	2.504035	-0.822950
C	0.411775	2.533117	-2.598148
C	3.875758	-2.259345	0.393960
C	4.081401	-2.129374	1.773674
C	5.341480	-2.329536	2.325295
C	6.421003	-2.651907	1.503107
C	6.227376	-2.782386	0.130871
C	4.960434	-2.591635	-0.420952
C	5.410290	0.833116	-1.814723
C	1.335888	2.336596	2.504703
O	-6.410456	-0.794190	2.411607
C	-7.842226	-1.093150	2.349764



C	-8.510303	0.109476	2.980222
C	-7.474255	0.549125	4.011346
C	-6.177248	0.377654	3.254006
O	-1.372261	3.914369	1.264130
H	-6.019828	-0.553080	-0.504362
H	-5.868655	-0.733295	1.313646
H	-0.020962	-0.067982	-0.017858
H	1.254540	-0.018701	-1.883087
H	-0.399037	1.816292	-2.753979
H	0.087467	3.541951	-2.870736
H	1.293488	2.234148	-3.171511
H	5.088405	0.853719	-2.862046
H	6.201354	1.581752	-1.684182
H	5.827904	-0.156083	-1.592832
H	0.889158	5.356950	-0.899195
H	2.748618	7.004435	-1.028684
H	5.104349	6.202883	-1.054420
H	5.598129	3.793789	-0.927693
H	1.808255	3.117894	1.898583
H	0.257515	2.321457	2.315239
H	1.522566	2.526408	3.565650
H	3.536178	0.912813	4.449037
H	5.946479	1.319060	4.899721
H	7.519938	1.630458	2.995094
H	6.685865	1.565426	0.676702
H	3.245224	-1.883929	2.430010
H	5.481774	-2.223073	3.398982
H	7.408672	-2.802596	1.932927
H	7.062107	-3.039837	-0.517588
H	4.824748	-2.709192	-1.495020
H	-0.631548	-1.976929	0.487545
H	-2.067650	-3.742846	1.469926
H	-1.066395	-5.877304	2.255461
H	1.386457	-6.238873	2.044673
H	2.806222	-4.514199	1.006881
H	3.183035	-0.981790	-2.855644
H	3.309159	-1.981767	-5.112150
H	2.391495	-4.258949	-5.522268
H	1.375854	-5.529916	-3.641160
H	1.276714	-4.553081	-1.390864
H	-0.826789	3.582426	0.531847
H	-2.249837	4.034917	0.878867
H	-7.998976	-2.012967	2.922202
H	-8.098873	-1.270952	1.300346
H	-9.477715	-0.145346	3.420514
H	-8.669695	0.898706	2.234128
H	-7.612701	1.577809	4.353603



H	-7.495779	-0.110643	4.886955
H	-5.293908	0.168857	3.864571
H	-5.974768	1.230519	2.590635
H	-5.233418	-0.175627	-2.816262
H	-6.588175	-1.117602	-3.491992
H	-6.084732	1.466081	-4.360958
H	-7.752510	0.882998	-4.184680
H	-7.739997	2.827760	-2.690398
H	-6.109458	2.431139	-2.106286
H	-7.424986	1.342665	-0.388856
H	-8.707790	0.905343	-1.551765
H	-1.885010	1.428938	1.656352
H	-0.966346	1.163745	3.930627
H	-1.521702	-0.841520	5.281030
H	-3.013413	-2.595962	4.344567
H	-3.946362	-2.343480	2.078200
H	-4.650172	2.253409	1.069846
H	-4.771245	4.557230	0.215022
H	-3.825089	5.112747	-2.017720
H	-2.811865	3.321407	-3.410410
H	-2.747913	0.999446	-2.591740
H	-1.292334	-0.539507	-1.756368
H	-3.861269	-4.747401	-2.298764
H	-4.752336	-2.960214	-0.852870
H	-0.434035	-2.312046	-3.218377
H	-1.698749	-4.436615	-3.485788

TS_2SCS_Et₃SiH Número de átomos: 126

C	3.532283	3.122153	0.037614
C	2.678816	2.631597	1.033701
C	2.978659	2.900200	2.371539
C	4.112309	3.640374	2.707384
C	4.950097	4.129562	1.709903
C	4.654394	3.870205	0.372128
P	1.201724	1.651086	0.523098
C	0.509085	2.750991	-0.784907
C	-0.136678	2.209115	-1.898003
C	-0.685852	3.041728	-2.873036
C	-0.596499	4.423958	-2.743418
C	0.042858	4.975483	-1.632689
C	0.593873	4.146166	-0.662508
Ir	1.407919	-0.614315	-0.057264
S	1.214871	-2.941296	-0.419622
C	0.360528	-3.667768	1.021755
S	2.716922	-0.181079	-2.153899
C	4.256718	0.196934	-1.317144
C	4.360553	-0.086235	0.052859



C	5.496930	0.401193	0.710866
C	6.503078	1.074725	0.023431
C	6.404707	1.285501	-1.349283
C	5.260633	0.861364	-2.018038
C	3.338188	-0.990525	0.732458
C	3.770088	-2.441333	0.410624
C	2.896145	-3.423222	-0.055653
C	3.295951	-4.735947	-0.316496
C	4.614997	-5.105484	-0.094474
C	5.515717	-4.148566	0.373738
C	5.099076	-2.845558	0.618156
C	3.174896	-1.687324	-3.081962
C	0.045500	1.899550	1.945642
C	-0.987897	2.840667	1.910259
C	-1.818510	3.026227	3.015233
C	-1.615205	2.289342	4.178221
C	-0.588301	1.347620	4.224515
C	0.222629	1.144408	3.113009
C	3.361417	-0.856558	2.257435
O	-0.079582	-1.477194	-3.624568
C	-3.134758	0.032159	-2.660468
C	-3.798162	-0.733319	-3.804519
Si	-2.901704	-0.941180	-1.058860
C	-2.669188	-2.819259	-1.173063
C	-3.342605	-3.691390	-0.114531
O	-4.882337	-1.196680	-0.915963
C	-2.837788	0.081563	0.521744
C	-2.556902	-0.710104	1.795591
O	-6.177246	1.040457	-1.527062
C	-6.708296	1.457841	-2.798472
C	-7.864149	2.376241	-2.455967
C	-8.413846	1.715910	-1.195028
C	-7.140962	1.289564	-0.484661
O	-5.910081	-1.509576	1.577970
C	-5.975939	-0.437660	2.537668
C	-5.875028	-1.104944	3.895849
C	-6.575535	-2.434945	3.635080
C	-6.074466	-2.775733	2.244777
H	-5.223691	-1.372484	-0.002565
H	-5.379146	-0.397986	-1.240903
H	-0.869563	-0.714393	-1.176526
H	-3.063370	-3.090254	-2.165606
H	-1.593804	-3.035328	-1.210838
H	-3.117773	-4.752516	-0.278209
H	-4.434254	-3.589023	-0.136604
H	-3.008015	-3.443665	0.901852
H	-3.336467	-1.461386	1.985449



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	-1.590663	-1.230745	1.729684
H	-2.505637	-0.054650	2.675357
H	-2.062479	0.845318	0.376720
H	-3.792551	0.627332	0.607126
H	-2.159729	0.409564	-2.988144
H	-3.730243	0.920550	-2.391505
H	-3.160786	-1.554454	-4.156217
H	-4.759648	-1.174450	-3.512546
H	-3.984230	-0.080375	-4.666038
H	0.697923	-0.863691	1.340300
H	-0.667124	-3.293752	1.007540
H	0.363329	-4.756547	0.919359
H	0.860437	-3.357065	1.942165
H	2.594742	-1.498280	2.704983
H	4.324757	-1.168370	2.687872
H	3.180430	0.178308	2.572629
H	2.574579	-5.454177	-0.703610
H	4.941493	-6.122212	-0.296573
H	6.555702	-4.417521	0.543166
H	5.830566	-2.121197	0.970664
H	3.612707	-2.438024	-2.416753
H	2.246748	-2.051350	-3.532425
H	3.889586	-1.407124	-3.860243
H	5.129512	1.067222	-3.079648
H	7.192034	1.807094	-1.887848
H	7.370434	1.439843	0.569572
H	5.609585	0.250367	1.782352
H	3.314972	2.934087	-1.013488
H	5.302616	4.246583	-0.416280
H	5.828670	4.714647	1.971755
H	4.328741	3.843995	3.753636
H	2.322948	2.550563	3.166762
H	-0.219111	1.126527	-1.995469
H	-1.179215	2.603903	-3.738566
H	-1.021085	5.073096	-3.505730
H	0.114967	6.054941	-1.522340
H	1.091672	4.591222	0.198063
H	0.999870	0.383608	3.156930
H	-0.424756	0.758480	5.123968
H	-2.257597	2.441557	5.042482
H	-2.624302	3.754894	2.962181
H	-1.168667	3.428109	1.012825
H	-0.314235	-1.241841	-2.702783
H	-0.542885	-2.303431	-3.799378
H	-5.900147	1.937430	-3.361559
H	-7.049356	0.570941	-3.353457
H	-8.596472	2.447162	-3.265359



H	-7.497149	3.386242	-2.233091
H	-9.028173	2.382896	-0.583462
H	-9.019029	0.839151	-1.458572
H	-7.253468	0.371987	0.109466
H	-6.745031	2.082465	0.166245
H	-6.763669	-3.388415	1.653898
H	-5.097341	-3.282999	2.283897
H	-6.331119	-3.209512	4.367585
H	-7.664528	-2.298929	3.628983
H	-6.342323	-0.511161	4.686696
H	-4.823890	-1.271603	4.166862
H	-5.165742	0.271788	2.323592
H	-6.938362	0.082659	2.418825

CO_2SCS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

C	-1.731445	-1.361593	3.674779
C	-1.502750	-2.131510	2.525650
C	-0.836711	-3.357062	2.658847
C	-0.411248	-3.799264	3.908706
C	-0.642466	-3.025642	5.043837
C	-1.304386	-1.806417	4.924281
P	-2.137962	-1.585241	0.875696
Ir	-2.006753	0.752693	0.712150
S	-0.820263	0.752229	-1.493555
C	-0.577516	2.381525	-2.287048
C	-1.086973	-2.581344	-0.259480
C	0.213308	-2.118383	-0.486965
C	1.105508	-2.835002	-1.278439
C	0.702508	-4.040106	-1.851731
C	-0.581341	-4.525220	-1.614768
C	-1.469831	-3.805316	-0.818499
C	-3.797000	-2.361980	0.808550
C	-4.534616	-2.549173	1.982911
C	-5.843725	-3.020566	1.924746
C	-6.429989	-3.313079	0.694957
C	-5.699540	-3.136350	-0.478065
C	-4.392771	-2.661482	-0.421831
S	-1.829428	3.099346	0.993164
C	-2.666762	3.545352	2.550536
C	-3.678949	1.129120	-0.518093
C	-3.525894	0.323114	-1.803734
C	-2.257419	0.145623	-2.380620
C	-2.064567	-0.556997	-3.567083
C	-3.162264	-1.100957	-4.230017
C	-4.433029	-0.934518	-3.686422
C	-4.608777	-0.235428	-2.493321
C	-3.021603	3.615030	-0.230939



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	-3.732415	2.622630	-0.907325
C	-4.570874	3.057062	-1.945696
C	-4.687315	4.402252	-2.276275
C	-3.965629	5.369972	-1.576803
C	-3.119589	4.970707	-0.551289
C	-5.003050	0.850190	0.204720
O	-0.083430	0.746024	2.081359
O	4.354698	-2.101628	-1.895670
C	4.281488	-2.649299	-3.210375
C	5.629416	-3.322349	-3.418195
C	5.992935	-3.813953	-2.004344
C	4.980706	-3.105926	-1.092373
O	6.351976	-0.081108	-1.747909
O	6.767482	-0.648930	1.012255
C	6.869226	0.606866	1.694188
C	8.276701	1.077461	1.395608
C	9.054307	-0.230897	1.522689
C	8.069435	-1.262274	0.970530
C	3.342242	-0.330148	0.714385
Si	2.899779	1.161836	-0.338880
C	2.897687	0.822705	-2.178391
C	4.047785	2.573793	0.123326
C	3.874446	3.240701	1.345867
C	4.764734	4.227120	1.764021
C	5.850199	4.567901	0.957034
C	6.036794	3.921937	-0.263766
C	5.144201	2.932055	-0.674054
H	3.889044	0.479468	-2.496648
H	-1.054555	-0.691702	-3.953235
H	-3.022805	-1.658628	-5.152441
H	-5.299107	-1.362703	-4.186628
H	-5.613216	-0.144724	-2.085317
H	-5.142183	2.325677	-2.514417
H	-5.343888	4.697826	-3.091171
H	-4.049760	6.421175	-1.839309
H	-2.520734	5.700282	-0.008320
H	-5.061434	1.453690	1.116840
H	-5.874427	1.122970	-0.408928
H	-5.103639	-0.202822	0.486932
H	-2.072014	3.106817	3.356567
H	-2.680955	4.634357	2.645604
H	-3.679024	3.135833	2.559353
H	0.177142	2.917193	-1.702614
H	-0.203327	2.206788	-3.299523
H	-1.508368	2.953205	-2.316754
H	-4.094157	-2.323327	2.952338
H	-6.405606	-3.159849	2.845118



H	-7.452531	-3.680111	0.651650
H	-6.146225	-3.359923	-1.444940
H	-3.844970	-2.513379	-1.349930
H	-2.455901	-4.218731	-0.622407
H	-0.894425	-5.474532	-2.042578
H	1.391680	-4.608310	-2.473403
H	2.114060	-2.450221	-1.442349
H	0.542023	-1.185703	-0.031143
H	-2.249441	-0.406949	3.593744
H	-1.491120	-1.195241	5.803958
H	-0.306612	-3.371886	6.018222
H	0.104672	-4.752697	3.992577
H	-0.644374	-3.976629	1.785009
H	-2.921395	0.699157	2.016183
H	1.516937	1.605613	0.067725
H	4.380056	-0.628181	0.515972
H	2.704589	-1.202669	0.524185
H	2.168564	0.041020	-2.430735
H	2.648501	1.728746	-2.744175
H	5.639888	-0.720023	-1.928347
H	6.488155	-0.168919	-0.786949
H	0.109280	-0.049942	2.598900
H	0.717473	0.963208	1.577529
H	6.077309	1.261524	1.308861
H	6.714594	0.458525	2.775555
H	8.622886	1.861340	2.076558
H	8.326033	1.465318	0.367768
H	10.002525	-0.229375	0.977180
H	9.274116	-0.435168	2.578094
H	8.049075	-2.190396	1.555872
H	8.278776	-1.519677	-0.077637
H	5.430601	-2.602933	-0.226829
H	4.206436	-3.802602	-0.728214
H	5.905387	-4.901456	-1.913513
H	7.022276	-3.545019	-1.744715
H	6.361306	-2.586746	-3.771459
H	5.583641	-4.130028	-4.154950
H	3.455082	-3.381016	-3.257736
H	4.063202	-1.830235	-3.904019
H	3.275850	-0.075445	1.781571
H	5.321325	2.412707	-1.615860
H	6.884265	4.182902	-0.894548
H	6.548336	5.337614	1.279234
H	4.613214	4.730928	2.716416
H	3.030572	2.984210	1.990180

TS_2SCS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	3.757255	-2.001635	2.567533
C	3.344437	-1.710124	1.258918
C	3.138852	-2.780069	0.380427
C	3.316898	-4.099726	0.792376
C	3.707127	-4.371822	2.102985
C	3.932402	-3.319051	2.990660
Si	3.054281	0.063060	0.726997
C	2.743098	1.358725	2.041896
O	4.967863	0.425729	0.743635
C	2.857617	0.426632	-1.101162
O	5.044644	2.852245	-0.268969
C	5.270599	4.135979	0.338085
C	5.438227	5.096401	-0.823662
C	6.122656	4.210591	-1.861391
C	5.406761	2.887217	-1.661789
O	6.531356	-1.313250	-0.486672
C	6.264007	-1.759265	-1.828491
C	6.148188	-3.270182	-1.743249
C	7.101222	-3.596155	-0.596913
C	6.860810	-2.438995	0.354445
C	0.337945	-2.785777	-2.260145
S	-0.552085	-2.779873	-0.664004
C	-2.112975	-3.463522	-1.203338
C	-3.189036	-2.590287	-1.360393
C	-4.412440	-3.175226	-1.724983
C	-4.540142	-4.546211	-1.916015
C	-3.443443	-5.391640	-1.746972
C	-2.221216	-4.844017	-1.382298
C	-3.072904	-1.058269	-1.190035
C	-3.143299	-0.449063	-2.593252
Ir	-1.252280	-0.561245	-0.233912
P	-1.500214	1.754685	0.020035
C	-3.044911	2.605942	-0.516196
C	-3.167054	3.229789	-1.761345
C	-4.368206	3.829083	-2.137581
C	-5.454693	3.828463	-1.266700
C	-5.337885	3.217284	-0.019876
C	-4.147298	2.600103	0.346737
S	-2.568683	-1.134985	1.822728
C	-4.166100	-0.790924	1.084622
C	-4.241726	-0.638285	-0.308804
C	-5.462565	-0.192090	-0.828826
C	-6.564817	0.031834	-0.007568
C	-6.477616	-0.173054	1.366583
C	-5.260971	-0.568442	1.916476
C	-2.692332	-2.923237	2.175493
C	-0.176224	2.649943	-0.910674



C	0.644053	3.599803	-0.294060
C	1.635800	4.259794	-1.019634
C	1.810700	3.993422	-2.373992
C	0.997487	3.048653	-2.999505
C	0.023461	2.375163	-2.270604
C	-1.308068	2.405537	1.731959
C	-0.685116	1.621376	2.704444
C	-0.479447	2.115949	3.991090
C	-0.890310	3.404743	4.316284
C	-1.505519	4.201155	3.349180
C	-1.714092	3.705943	2.066646
O	0.389072	-2.006214	2.896653
H	1.954577	-0.028360	-1.519310
H	3.662805	1.855622	2.372377
H	5.556836	-0.210251	0.247742
H	5.151602	1.353959	0.436617
H	1.046122	-0.322571	0.843018
H	2.762915	1.515596	-1.226171
H	3.734000	0.100736	-1.676891
H	2.263036	0.895087	2.912597
H	2.048146	2.114792	1.656099
H	-0.555238	-0.171227	-1.606692
H	1.249443	-2.196854	-2.128753
H	0.591609	-3.818644	-2.515965
H	-0.288512	-2.333294	-3.032331
H	-2.274191	-0.758529	-3.183644
H	-4.035833	-0.779322	-3.146164
H	-3.161245	0.646782	-2.553364
H	-1.351265	-5.479053	-1.221304
H	-3.544486	-6.464989	-1.884694
H	-5.507499	-4.959427	-2.191977
H	-5.290701	-2.545226	-1.851924
H	-2.986565	-3.482090	1.282082
H	-1.696691	-3.222528	2.518118
H	-3.426772	-3.066509	2.972467
H	-5.149617	-0.685109	2.993643
H	-7.337096	0.002002	2.008862
H	-7.497094	0.379092	-0.448184
H	-5.563483	-0.014219	-1.897669
H	-4.078789	2.117321	1.321184
H	-6.180133	3.207872	0.668662
H	-6.387549	4.306546	-1.556333
H	-4.446012	4.309824	-3.110008
H	-2.323737	3.264702	-2.447991
H	-0.339194	0.622955	2.447437
H	0.006151	1.487374	4.734984
H	-0.732282	3.792407	5.320096



H	-1.823487	5.211864	3.594231
H	-2.189595	4.340768	1.320267
H	-0.579757	1.616400	-2.767325
H	1.128480	2.826720	-4.056106
H	2.576956	4.517426	-2.943230
H	2.268007	4.989910	-0.516483
H	0.522700	3.832099	0.762150
H	0.613971	-1.476269	2.104751
H	1.195180	-2.499241	3.092735
H	4.417424	4.357430	0.989587
H	6.180645	4.085126	0.953307
H	6.019932	5.982464	-0.553990
H	4.458592	5.430948	-1.192479
H	6.027244	4.584629	-2.885098
H	7.190871	4.110808	-1.631213
H	6.022308	2.005027	-1.881958
H	4.484403	2.827633	-2.260768
H	7.733966	-2.168211	0.956711
H	6.009949	-2.633028	1.026103
H	6.897755	-4.564077	-0.128031
H	8.140276	-3.596677	-0.949792
H	6.413506	-3.761345	-2.684071
H	5.123103	-3.561507	-1.478708
H	5.349289	-1.265991	-2.182644
H	7.099739	-1.447774	-2.470645
H	2.834233	-2.582608	-0.649329
H	3.148777	-4.915556	0.091303
H	3.839127	-5.400195	2.431169
H	4.246354	-3.524333	4.011808
H	3.939247	-1.189230	3.272837

C1_2SCS_Me₂PhSiH Número de átomos: 124

C	5.981263	0.054066	1.043429
C	4.728023	0.421070	0.556984
C	4.440745	0.502259	-0.816360
C	5.472771	0.104037	-1.680496
C	6.725244	-0.281647	-1.209443
C	6.998852	-0.282416	0.155899
S	3.389074	0.637135	1.739515
C	3.734091	2.328373	2.339381
Ir	1.498338	0.517023	0.117205
P	1.513273	-1.772157	-0.024545
C	1.386563	-2.721444	1.554778
C	1.077009	-2.083966	2.756253
C	0.942653	-2.815297	3.936537
C	1.117454	-4.195456	3.924947
C	1.435020	-4.843517	2.730142



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	1.573338	-4.111606	1.556293
S	1.061598	2.840169	0.237813
C	2.393159	3.494925	-0.767189
C	3.278972	2.592121	-1.361730
C	4.345752	3.170493	-2.073578
C	4.509029	4.545862	-2.182894
C	3.603418	5.415256	-1.573134
C	2.543930	4.882172	-0.852636
C	-0.380405	3.199701	-0.818538
C	3.112188	1.060590	-1.302496
C	2.794435	0.612852	-2.736173
C	0.074702	-2.413810	-0.993142
C	-0.882551	-3.266137	-0.435510
C	-1.963979	-3.717614	-1.194025
C	-2.091045	-3.340606	-2.527518
C	-1.147733	-2.481263	-3.091614
C	-0.088710	-2.006976	-2.325031
C	2.960579	-2.644961	-0.775329
C	4.120386	-2.748768	0.004121
C	5.261158	-3.365239	-0.495026
C	5.267299	-3.881713	-1.790306
C	4.122466	-3.781942	-2.574834
C	2.974068	-3.171056	-2.069133
C	-3.934061	4.194660	1.040131
C	-3.966645	2.856826	0.657505
C	-3.241869	1.883079	1.364346
C	-2.483198	2.290287	2.469712
C	-2.439806	3.630843	2.850794
C	-3.162954	4.583183	2.135736
Si	-3.231395	0.113813	0.789238
O	-4.956941	-0.313317	0.777587
C	-2.724509	-0.038405	-0.987133
C	-2.523193	-1.112129	1.980057
O	-5.789033	-2.602037	0.267995
C	-5.920851	-2.673288	-1.173588
C	-7.382584	-2.385670	-1.444013
C	-8.046850	-3.078496	-0.257781
C	-7.101554	-2.743352	0.880897
O	-6.544972	0.939727	-0.757488
C	-7.650191	1.636334	-0.136839
C	-8.048981	2.693138	-1.145975
C	-7.756666	1.984898	-2.465664
C	-6.447866	1.287130	-2.155852
O	0.598007	1.509463	3.576411
H	-5.556663	0.235794	0.167685
H	-5.227036	-1.308579	0.633009
H	0.205538	0.260896	1.164326



H	-1.651340	0.173008	-1.088725
H	-2.898119	-1.056423	-1.360780
H	-1.436996	-0.976781	2.059630
H	-2.707653	-2.134653	1.624388
H	0.423234	0.438029	-1.050251
H	-1.250440	2.756414	-0.321528
H	-0.510128	4.283527	-0.889759
H	-0.234063	2.751648	-1.805066
H	1.817874	1.009684	-3.041636
H	3.525141	0.961497	-3.485977
H	2.754734	-0.483125	-2.807628
H	1.836267	5.535366	-0.343292
H	3.731752	6.492369	-1.645635
H	5.354114	4.943911	-2.740600
H	5.076789	2.519570	-2.550683
H	3.767495	3.039270	1.507693
H	2.932347	2.584841	3.037287
H	4.693086	2.319371	2.864320
H	6.144584	-0.001420	2.119487
H	7.976381	-0.579593	0.528125
H	7.493063	-0.585732	-1.918599
H	5.298033	0.094919	-2.754818
H	4.130872	-2.360581	1.022646
H	6.149092	-3.438177	0.129322
H	6.159998	-4.363336	-2.182935
H	4.112406	-4.189729	-3.583281
H	2.085187	-3.126461	-2.694635
H	0.939537	-1.005453	2.765170
H	0.704687	-2.299323	4.863988
H	1.012842	-4.767836	4.843891
H	1.577221	-5.921687	2.713535
H	1.822955	-4.628952	0.630126
H	0.613385	-1.301162	-2.767635
H	-1.244430	-2.166787	-4.128381
H	-2.924690	-3.705677	-3.123877
H	-2.703267	-4.371985	-0.735250
H	-0.797622	-3.583846	0.601912
H	0.576958	1.179635	2.655172
H	0.408908	2.451758	3.505659
H	-5.634242	-3.682876	-1.495272
H	-5.215158	-1.952927	-1.609768
H	-7.712130	-2.767465	-2.414257
H	-7.570513	-1.301834	-1.409233
H	-9.063819	-2.727357	-0.061939
H	-8.085016	-4.162365	-0.421510
H	-7.031898	-3.512006	1.655105
H	-7.354465	-1.781901	1.352105



H	-5.587851	1.959446	-2.294299
H	-6.274926	0.367631	-2.726872
H	-7.674327	2.662973	-3.319272
H	-8.540375	1.247395	-2.684739
H	-9.091661	3.002967	-1.036465
H	-7.411184	3.581293	-1.039546
H	-7.304483	2.032332	0.824904
H	-8.456050	0.909249	0.041500
H	-3.275834	0.669248	-1.620596
H	-2.967407	-0.999663	2.975586
H	-4.569845	2.573598	-0.208204
H	-4.504662	4.934625	0.483132
H	-3.130683	5.628491	2.434197
H	-1.847230	3.932837	3.712406
H	-1.907286	1.558429	3.037640

CO_2SCS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	1.014949	-3.712655	1.343356
C	0.949983	-2.531425	0.597132
C	-0.207813	-1.751224	0.679265
C	-1.270664	-2.116269	1.498465
C	-1.180075	-3.278471	2.263529
C	-0.040404	-4.075120	2.179707
P	2.213401	-1.978733	-0.621245
C	1.413818	-2.494047	-2.208262
C	0.343924	-3.397976	-2.218364
C	-0.249906	-3.778031	-3.420103
C	0.211937	-3.262164	-4.628179
C	1.282709	-2.370858	-4.632086
C	1.879680	-1.990306	-3.432000
Ir	2.730197	0.314146	-0.735971
S	3.224275	2.570221	-1.262593
C	4.258130	2.594721	-2.763989
S	1.447802	0.901201	1.321971
C	1.539600	2.636090	1.886437
C	2.596071	0.076311	2.422771
C	3.892402	-0.191690	1.953289
C	4.719359	-0.944151	2.795682
C	4.272271	-1.404848	4.033427
C	2.980780	-1.123440	4.472042
C	2.133758	-0.378557	3.654754
C	4.348935	0.380454	0.616815
C	5.596579	-0.314193	0.057605
C	3.610708	-3.152752	-0.447426
C	4.257175	-3.655878	-1.581585
C	5.398911	-4.442940	-1.451032
C	5.906677	-4.739286	-0.187849



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	5.265007	-4.247693	0.946987
C	4.127136	-3.457448	0.817492
C	4.419201	2.897808	0.021660
C	4.774387	1.844195	0.865275
C	5.615063	2.165643	1.942315
C	6.071799	3.462011	2.150477
C	5.703408	4.491763	1.283962
C	4.862926	4.207635	0.216358
O	1.023012	0.723664	-2.326200
C	-2.040388	1.486006	2.408508
C	-2.715863	2.097474	1.341576
C	-3.774326	2.966716	1.642251
C	-4.148240	3.213964	2.961579
C	-3.458937	2.602294	4.008251
C	-2.401370	1.738184	3.730224
Si	-2.204651	1.735930	-0.423405
C	-3.306005	0.545684	-1.366298
C	-4.644988	0.861568	-1.641036
C	-5.460484	-0.014873	-2.352733
C	-4.945138	-1.227073	-2.813918
C	-3.616403	-1.557866	-2.558483
C	-2.808943	-0.678345	-1.837609
C	-1.971404	3.322102	-1.402614
C	-1.510425	4.489277	-0.773527
C	-1.232067	5.640146	-1.507439
C	-1.410361	5.642852	-2.890399
C	-1.868026	4.494629	-3.534210
C	-2.144960	3.345846	-2.794666
O	-8.440348	-0.010531	-0.881619
C	-9.603049	0.331387	-0.118517
C	-9.845539	-0.872925	0.767376
C	-9.524940	-2.014130	-0.195196
C	-8.382896	-1.438530	-1.030938
O	-6.600069	0.920749	1.081788
C	-4.903484	-2.062746	0.918020
O	-4.390937	-0.890776	1.552458
C	-4.550386	-1.027727	2.973968
C	-5.389921	-2.286695	3.203766
C	-6.015563	-2.534998	1.832406
H	1.107718	-0.165550	3.957219
H	2.629543	-1.492253	5.432219
H	4.940472	-1.996423	4.655446
H	5.729816	-1.194190	2.478702
H	5.916284	1.384335	2.637856
H	6.718179	3.671684	2.999466
H	6.054333	5.506894	1.449533
H	4.533862	4.996875	-0.457789



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	5.887535	0.155528	-0.888138
H	6.459025	-0.220869	0.734476
H	5.426569	-1.379007	-0.131329
H	3.623262	2.239296	-3.580265
H	4.575464	3.622792	-2.957645
H	5.117682	1.933568	-2.635554
H	0.962378	3.232028	1.171060
H	1.069902	2.694712	2.872871
H	2.572627	2.992451	1.928627
H	3.877688	-3.434131	-2.577069
H	5.891451	-4.825474	-2.341663
H	6.798757	-5.352840	-0.088583
H	5.652360	-4.469849	1.939256
H	3.655545	-3.062020	1.714270
H	1.875176	-4.372202	1.267426
H	0.026994	-4.994126	2.756937
H	-2.002711	-3.570678	2.913520
H	-2.170536	-1.497967	1.526437
H	-0.293760	-0.850342	0.075763
H	2.714960	-1.290422	-3.447608
H	1.656456	-1.965814	-5.569289
H	-0.259101	-3.554582	-5.563357
H	-1.080618	-4.480024	-3.407505
H	-0.039839	-3.810968	-1.287273
H	3.677076	-0.149563	-1.935053
H	-0.871833	1.062019	-0.335609
H	-5.753426	0.441048	1.101318
H	-7.079241	0.591740	0.300137
H	0.730993	-0.037806	-2.851614
H	0.225664	1.115911	-1.939646
H	-9.384904	1.258543	0.422710
H	-10.453435	0.508977	-0.796101
H	-10.863119	-0.914935	1.167341
H	-9.140816	-0.860771	1.610411
H	-9.240036	-2.943122	0.309475
H	-10.395253	-2.228759	-0.827618
H	-8.460672	-1.694205	-2.096105
H	-7.396942	-1.774088	-0.674242
H	-5.216527	-1.781201	-0.096092
H	-4.107485	-2.825155	0.831816
H	-6.300776	-3.578424	1.663424
H	-6.904537	-1.902335	1.693966
H	-6.128213	-2.153634	4.000062
H	-4.748567	-3.133131	3.481511
H	-3.557259	-1.087947	3.445190
H	-5.040577	-0.114651	3.340592
H	-5.065050	1.806402	-1.291365



H	-6.501959	0.244729	-2.535865
H	-5.582452	-1.913009	-3.368905
H	-3.207097	-2.501768	-2.914157
H	-1.775543	-0.967709	-1.637017
H	-4.317908	3.464402	0.837716
H	-4.976291	3.886985	3.173270
H	-3.746545	2.800058	5.038617
H	-1.859062	1.255042	4.541640
H	-1.213431	0.802067	2.208172
H	-2.504852	2.454778	-3.311229
H	-2.012234	4.494525	-4.612451
H	-1.196087	6.541066	-3.465296
H	-0.879149	6.535895	-1.000950
H	-1.373376	4.504112	0.308917

TS_2SCS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-2.373192	-1.057146	3.424346
C	-2.731782	-1.361392	2.102949
C	-3.213038	-2.651215	1.830357
C	-3.349486	-3.597436	2.844404
C	-3.027971	-3.264134	4.158448
C	-2.537209	-1.991791	4.445075
Si	-2.740723	-0.037052	0.774130
C	-2.567475	-0.483458	-1.030450
C	-1.944353	-1.674811	-1.417799
C	-1.895333	-2.049642	-2.757250
C	-2.427449	-1.216853	-3.740473
C	-3.036639	-0.017873	-3.374904
C	-3.121751	0.330244	-2.027892
C	-3.046946	1.740617	1.291847
C	-3.630889	2.026781	2.536683
C	-3.830787	3.342203	2.952556
C	-3.470594	4.402582	2.120131
C	-2.924465	4.137697	0.866151
C	-2.716827	2.819986	0.464142
O	-4.754320	-0.272961	0.645512
C	1.125198	-3.900929	-1.708675
C	1.531255	-2.564182	-1.781067
C	1.542974	-1.938179	-3.033495
C	1.209093	-2.640727	-4.187581
C	0.832885	-3.979843	-4.107139
C	0.773816	-4.600955	-2.862331
P	2.230723	-1.679110	-0.312491
C	1.789915	-2.754899	1.117909
C	0.848118	-2.332572	2.058202
C	0.532100	-3.141101	3.149833
C	1.140486	-4.380962	3.307654



C	2.076427	-4.816247	2.369599
C	2.402691	-4.007344	1.287859
Ir	1.551904	0.578781	-0.162356
S	2.724192	1.043892	2.022404
C	2.620475	2.769267	2.624162
S	0.558591	2.708348	-0.358721
C	2.017276	3.684127	-0.675339
C	3.216033	3.006639	-0.887030
C	4.351660	3.808333	-1.086187
C	4.278758	5.196498	-1.065970
C	3.062097	5.841821	-0.843369
C	1.921681	5.076404	-0.642980
C	3.320635	1.463567	-0.944471
C	4.512544	1.099355	-0.067084
C	4.375729	1.054936	1.327146
C	5.470910	0.932816	2.179076
C	6.751174	0.826814	1.645281
C	6.907538	0.799510	0.261873
C	5.805672	0.932300	-0.578506
C	-0.204968	2.785201	-2.021701
C	3.542098	1.096841	-2.413161
C	4.021116	-2.108149	-0.486877
C	4.592891	-2.467133	-1.710242
C	5.943296	-2.808731	-1.787689
C	6.732593	-2.807462	-0.642216
C	6.168735	-2.452650	0.582911
C	4.826732	-2.101214	0.658363
O	-5.515485	-2.565350	-0.503051
C	-6.611410	-3.076090	0.288481
C	-7.878048	-2.846501	-0.534689
C	-7.442984	-1.780916	-1.539453
C	-6.010413	-2.196817	-1.799184
O	-0.330852	1.724078	3.192774
O	-6.342273	1.552704	-0.564372
C	-6.377531	1.794967	-1.976743
C	-5.822732	3.194755	-2.135562
C	-6.451831	3.898436	-0.934824
C	-6.458151	2.810685	0.135932
H	-5.282705	0.433533	0.192342
H	-5.020179	-1.140948	0.238576
H	-0.711389	0.195703	0.924126
H	0.937733	0.287123	-1.595320
H	-0.943902	1.979887	-2.086736
H	-0.684684	3.762223	-2.142008
H	0.566514	2.634861	-2.780714
H	2.652830	1.340985	-3.004375
H	4.377354	1.659255	-2.855953



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	3.763092	0.030006	-2.535913
H	0.958940	5.547049	-0.446687
H	3.007435	6.926890	-0.815182
H	5.183520	5.780490	-1.217417
H	5.319796	3.339192	-1.249496
H	2.860804	3.473716	1.822463
H	1.595404	2.904533	2.979729
H	3.327866	2.879643	3.450460
H	5.313101	0.896513	3.256252
H	7.611978	0.728726	2.302031
H	7.897210	0.672508	-0.171985
H	5.965974	0.916067	-1.654263
H	4.401122	-1.836572	1.625895
H	6.776705	-2.445477	1.485048
H	7.782735	-3.084274	-0.700583
H	6.370113	-3.090812	-2.747514
H	3.988443	-2.504472	-2.614814
H	0.350725	-1.368487	1.943643
H	-0.198241	-2.792259	3.875539
H	0.890424	-5.007294	4.161110
H	2.559313	-5.784092	2.482837
H	3.147697	-4.354334	0.573570
H	1.822989	-0.890474	-3.114552
H	1.238007	-2.135732	-5.150575
H	0.571932	-4.531415	-5.007357
H	0.458570	-5.638815	-2.782593
H	1.076587	-4.412329	-0.750480
H	-0.406154	1.226773	2.355051
H	-1.065647	2.349784	3.167715
H	-6.424725	-4.133621	0.509901
H	-6.616661	-2.519947	1.236426
H	-8.723606	-2.537590	0.086375
H	-8.165493	-3.764527	-1.061487
H	-8.056994	-1.759621	-2.444879
H	-7.464286	-0.781025	-1.080164
H	-5.352186	-1.408766	-2.189091
H	-5.953213	-3.064372	-2.474053
H	-7.378250	2.799746	0.731429
H	-5.600063	2.890117	0.817544
H	-5.898540	4.786599	-0.613864
H	-7.475576	4.208665	-1.177238
H	-6.085496	3.651773	-3.094154
H	-4.725842	3.181735	-2.047577
H	-5.793577	1.007743	-2.469777
H	-7.418066	1.732931	-2.332734
H	-2.291102	2.636763	-0.520059
H	-2.653242	4.954355	0.198487



H	-3.624332	5.428823	2.445275
H	-4.272714	3.539307	3.926626
H	-3.931689	1.213370	3.196799
H	-1.484344	-2.320317	-0.666550
H	-1.422624	-2.988921	-3.036254
H	-2.366835	-1.504388	-4.788249
H	-3.458720	0.640290	-4.133115
H	-3.631725	1.255899	-1.754228
H	-3.507066	-2.926239	0.816691
H	-3.722118	-4.592069	2.607365
H	-3.151243	-3.995097	4.954606
H	-2.269229	-1.726655	5.465988
H	-1.952934	-0.081143	3.668950

C1_2SCS_Ph₃SiH Número de átomos: 138

C	-7.332811	1.531109	-1.176609
O	-7.325737	0.406432	-0.263740
C	-8.177231	0.684363	0.869849
C	-8.379340	2.185372	0.852750
C	-8.393377	2.479650	-0.644904
O	-5.168325	-0.721731	0.529850
Si	-3.578197	-0.078644	0.256123
C	-2.601203	-0.543908	1.765618
C	-1.868784	0.413290	2.481436
C	-1.146917	0.052331	3.618360
C	-1.147398	-1.270171	4.053372
C	-1.862932	-2.237592	3.347489
C	-2.580750	-1.875525	2.211720
C	-2.960809	-0.879971	-1.303286
C	-3.669564	-0.744654	-2.511043
C	-3.199886	-1.326485	-3.684688
C	-2.010166	-2.058568	-3.668780
C	-1.301462	-2.211172	-2.480871
C	-1.774847	-1.626568	-1.307822
C	-3.895118	1.750699	0.084689
C	-4.585350	2.444991	1.091250
C	-4.850274	3.807699	0.967257
C	-4.425568	4.500409	-0.168762
C	-3.737028	3.827816	-1.177003
C	-3.478552	2.464392	-1.047554
C	2.421823	-2.837224	-1.499591
C	1.926451	-4.100492	-1.164793
C	1.451994	-4.964139	-2.154406
C	1.480032	-4.582665	-3.491925
C	1.973591	-3.323740	-3.837650
C	2.427499	-2.456874	-2.849338
P	3.033063	-1.648854	-0.218659



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

C	2.928295	-2.664426	1.318832
C	1.844099	-2.515974	2.188440
C	1.716670	-3.346083	3.301236
C	2.667103	-4.330406	3.558501
C	3.751630	-4.485267	2.696402
C	3.880077	-3.657928	1.585084
Ir	1.864711	0.300406	-0.289170
S	2.376937	1.065689	2.010876
C	4.017382	1.727279	1.676933
C	4.407981	1.937004	0.341531
C	5.757460	2.273473	0.149653
C	6.643220	2.432979	1.212685
C	6.212381	2.259611	2.525066
C	4.888534	1.891177	2.752065
C	3.406588	1.833585	-0.798714
C	2.755872	3.220532	-0.953485
C	1.374096	3.428342	-1.005673
C	0.793924	4.687122	-1.185951
C	1.606087	5.802836	-1.332618
C	2.991047	5.638416	-1.281968
C	3.544169	4.376917	-1.097522
S	0.295188	2.019548	-0.737971
C	-0.302047	1.752533	-2.443625
C	4.860619	-1.660485	-0.493780
C	5.669560	-1.097862	0.501445
C	7.051833	-1.057021	0.356181
C	7.649704	-1.562668	-0.797560
C	6.855788	-2.125276	-1.792990
C	5.470659	-2.181383	-1.638622
C	4.099444	1.529531	-2.134829
C	1.496274	2.606076	2.450717
O	-5.700905	-3.042070	0.380865
C	-6.434938	-3.266868	-0.863665
C	-7.884628	-3.228253	-0.441721
C	-7.831980	-3.937456	0.909068
C	-6.549946	-3.403726	1.521799
O	-1.445316	3.784397	1.644912
H	-5.969511	-0.203666	0.186402
H	-5.382989	-1.853889	0.461639
H	0.614164	-0.715037	0.122168
H	1.655575	-0.118433	-1.807418
H	-0.910956	0.840914	-2.433347
H	-0.900469	2.616042	-2.752695
H	0.558505	1.619051	-3.103584
H	3.347720	1.410373	-2.925665
H	4.792080	2.319829	-2.474686
H	4.671485	0.592717	-2.074635



H	-0.292114	4.787081	-1.200263
H	1.167544	6.788172	-1.469107
H	3.644824	6.502436	-1.381173
H	4.628382	4.284311	-1.055817
H	1.633446	3.364860	1.673159
H	0.431407	2.373036	2.551815
H	1.885633	2.972531	3.404802
H	4.532987	1.698628	3.763792
H	6.900413	2.378401	3.358614
H	7.682323	2.686235	1.009879
H	6.136367	2.403327	-0.862568
H	5.218625	-0.693034	1.408128
H	7.661442	-0.619632	1.144187
H	8.730277	-1.524152	-0.915436
H	7.312550	-2.533133	-2.692093
H	4.872696	-2.644459	-2.420184
H	1.095222	-1.749699	1.983665
H	0.868285	-3.220333	3.970441
H	2.564408	-4.975085	4.428540
H	4.497839	-5.253256	2.887044
H	4.725477	-3.797171	0.912515
H	2.786834	-1.467531	-3.131220
H	1.995614	-3.011163	-4.879474
H	1.115062	-5.258019	-4.262492
H	1.060615	-5.938829	-1.871610
H	1.897951	-4.423113	-0.125692
H	-1.205248	3.328527	0.822905
H	-2.367831	4.045129	1.524193
H	-6.128856	-4.244321	-1.251203
H	-6.123927	-2.484327	-1.564098
H	-8.542153	-3.720225	-1.163176
H	-8.211950	-2.185225	-0.325900
H	-8.698850	-3.728512	1.541562
H	-7.767986	-5.022712	0.767244
H	-5.995760	-4.124291	2.127287
H	-6.708333	-2.485166	2.101586
H	-6.331128	1.985844	-1.164254
H	-7.538742	1.151232	-2.182422
H	-8.163850	3.523115	-0.881526
H	-9.374986	2.239548	-1.071704
H	-9.297914	2.488561	1.362951
H	-7.533018	2.690405	1.336479
H	-7.674070	0.303610	1.767739
H	-9.124566	0.143247	0.735360
H	-1.862783	1.457197	2.161144
H	-0.591446	0.806525	4.173198
H	-0.591662	-1.546034	4.947678



Universidad Euskal Herriko
del País Vasco Unibertsitatea

KIMIKA FAKULTATEA
FACULTAD DE QUÍMICA

H	-1.859738	-3.273125	3.681783
H	-3.129001	-2.646674	1.666674
H	-4.921359	1.917923	1.986641
H	-5.386837	4.331530	1.755600
H	-4.630732	5.563952	-0.264270
H	-3.402864	4.362153	-2.063954
H	-2.954583	1.945079	-1.849200
H	-1.192220	-1.738143	-0.392994
H	-3.757105	-1.209006	-4.611377
H	-4.601176	-0.173978	-2.539999
H	-0.373148	-2.778664	-2.463712
H	-1.635430	-2.511126	-4.585236