

CAPÍTULO V

Conclusiones

Los aspectos más relevantes del estudio descrito en los capítulos anteriores permite pueden resumirse en los siguientes apartados:

1. Se ha llevado a cabo una revisión bibliográfica acerca de una de las bases de datos cristalográficas más importantes en la actualidad: la *Cambridge Structural Database (CSD)*, dedicada a compuestos orgánicos y organometálicos.
2. Se ha realizado un análisis exhaustivo del pasado y presente del *Centro de Datos Cristalográficos de Cambridge (CCDC)* como institución y de su producto más importante: el sistema de la CSD. De este sistema se ha redactado también un extenso informe sobre el contenido del software que lo conforma, así como de las normas establecidas para la inserción de nuevos complejos en la base de datos y de sus aplicaciones más importantes, tanto en la química inorgánica como en la metálica y organometálica. Para ello han sido de gran ayuda los “*research papers*” (artículos de investigación) publicados por el propio CCDC, así como las referencias de numerosos y prestigiosos analistas de estructuras químicas como Allen, Orpen y Steiner.
3. Se ha determinado el número de estructuras contenidas en la CSD correspondientes a “*complejos planocuadrados dinucleares formados por los metales Ni, Pd, Pt, Co, Rh, Ir, Fe, Ru y/o Os y enlazados a través de ligandos de O, Cl, Br, I, S, N, P, CN y/o SCN*” y que se introdujo a través de la interface gráfica de *ConQuest*.

Atendiendo a los criterios anteriormente citados, se prepararon un total de 2025 búsquedas, encontrándose 568 complejos que se ajustaban a lo requerido en un principio.

Se puede concluir que de los 568 complejos que se encontraron, los más abundantes en la CSD son los complejos plano-cuadrados homodinucleares (un total de 563; heterodinucleares sólo se encontraron 5 complejos).

Dentro de los homodinucleares los más frecuentes son los complejos de paladio y platino (321 complejos del tipo $\{\text{Pd}(\mu\text{-X})\}_2$ y 132 del tipo $\{\text{Pt}(\mu\text{-X})\}_2$).

Atendiendo al átomo puente, los complejos planocuadrados dinucleares más abundantes en la CSD son los que tienen puentes de Cl o de S: 253 complejos del tipo $\{\text{M}(\mu\text{-Cl})\}_2$ y 179 del tipo $\{\text{M}(\mu\text{-SR})\}_2$.

4. Dentro de los grupos más frecuentes comentados en el apartado anterior se ha estudiado el carácter iónico de los complejos estableciéndose que:
 - En los complejos $\{\text{Pd}(\mu\text{-X})\}_2$ un 75,1% son neutros, mientras que un 10,9% son catiónicos y un 14% aniónicos.
 - En cuanto a los complejos $\{\text{Pt}(\mu\text{-X})\}_2$ un 50% son neutros, un 37,9% catiónicos y un 12,1% aniónicos.
 - Por lo que se refiere a los complejos con puente de cloro, $\{\text{M}(\mu\text{-Cl})\}_2$ un 80,6% son neutros, un 7,1% catiónicos y un 12,3% aniónicos.
 - En los complejos con puente de S, $\{\text{M}(\mu\text{-SR})\}_2$, un 46,4% son neutros, un 36,9% catiónicos y un 16,7% aniónicos.

5. Aunque existen pequeñas diferencias entre grupos, analizando los correspondientes a los complejos planocuadrados dinucleares recogidos en el apartado 3, se puede establecer que los cationes más frecuentes utilizados para cristalizar complejos aniónicos son n-tetrabutilamonio, tetraetilamonio y tetrafenilfosfonio. Los aniones encontrados con mayor frecuencia en las estructuras de complejos planocuadrados dinucleares catiónicos son tetrafenilborato, hexafluorofosfato y perchlorato.

6. Se han estudiado las características conformacionales de complejos dinucleares de Ni aniónicos con puentes de azufre cristalizados con tetraetilamonio como contraión obteniéndose los siguientes resultados:
- La distancia Ni-S presenta un valor comprendido entre 2,14-2,25 Å con un valor medio de 2,196 Å.
 - El ángulo de enlace S-Ni-S aparece comprendido en el intervalo 80-89° con un valor medio de 83,868 °.
 - El ángulo de enlace Ni-S-Ni oscila entre los valores 77 y 97° aunque mayoritariamente tienen un valor próximo a 80°.
 - La conformación del grupo $\{\text{Ni}(\mu\text{-S})\}_2$ se ha caracterizado usando el ángulo de torsión $\text{Ni}_1\text{-S}_1\text{-Ni}_2\text{-S}_2$ encontrándose dos tipos de conformaciones claramente diferenciadas: planas y de tipo “bent”.
7. La posición relativa del complejo aniónico de Ni con puentes de S y el catión tetrabutilamonio se ha estudiado utilizando dos parámetros:
- La distancia Ni-N presenta valores agrupados en la mayor parte de los casos alrededor de dos valores típicos: 4.6-4.9 Å
 - Mediante un diagrama de dispersión para los ángulos de torsión impropios $\text{S}_1\text{-S}_2\text{-Ni}\cdots\text{N}$ y $\text{S}_2\text{-S}_1\text{Ni}\cdots\text{N}$ se puede establecer la proyección de la posición del catión sobre el plano de coordinación del metal, de forma que se ha podido concluir que cuando los valores absolutos de los ángulos de torsión impropios anteriormente citados se aproximan, entonces el átomo central del contraión y el átomo metálico del complejo se encuentran en la misma línea con respecto a un plano perpendicular a dicha línea.