

**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**  
**Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial**



PROYECTO FIN DE CARRERA

**ESTUDIO IÓNICO DE COMPLEJOS DE  
COORDINACIÓN HOMODINUCLEARES CON  
GEOMETRÍA PLANO-CUADRADA MEDIANTE  
LA *CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE***

**Titulación:** INGENIERÍA TÉCNICA INDUSTRIAL  
Especialidad: QUÍMICA INDUSTRIAL

**Alumno:** D. JAVIER ARIOLA MENÁRGUEZ

**Director:** Dr. D. JOSÉ PÉREZ PÉREZ

Cartagena, Septiembre de 2005

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

**JAVIER ARIOLA MENÁRGUEZ**



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MINERA,  
GEOLÓGICA Y CARTOGRÁFICA

---

ÁREA DE QUÍMICA INORGÁNICA

**D. José Pérez**, profesor de la Universidad Politécnica de Cartagena, en el Área de Química Inorgánica, como **director del Proyecto Fin de Carrera** titulado: **ESTUDIO IÓNICO DE COMPLEJOS DE COORDINACIÓN HOMODINUCLEARES CON GEOMETRÍA PLANO-CUADRADA MEDIANTE LA *CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE***

**HACE CONSTAR:**

Que el mencionado Proyecto, ha sido realizado por el alumno **D. Javier Ariola Menárguez**, en el departamento de Ingeniería Minera, Geológica y Cartográfica.

Cartagena, Septiembre de 2005

Fdo.: José Pérez Pérez



## *CAPÍTULO I*

*Objetivos del proyecto.  
Introducción a la Cambridge Structural Database*



## *CAPÍTULO II*

### *Búsqueda inicial*



## **CAPÍTULO III**

### ***Estudio iónico de los complejos***



## **CAPÍTULO IV**

### ***Estudio conformacional de complejos seleccionados***



## *CAPÍTULO V*

### *Conclusiones*





## *ANEXO I*

### *RESULTADO DE LA BÚSQUEDA* *Capítulo 2. Búsqueda inicial*

---

**NOTA.-** en un principio el objetivo de este proyecto era el estudio de complejos plano-cuadrados de los metales indicados en la Tabla 2.1. del Capítulo 2, con puentes de oxígeno, cloro, bromo, yodo, cianuro y tiocianato. Estas búsquedas forman la primera parte del ANEXO I.

Posteriormente se añadieron al proyecto los puentes de nitrógeno, fósforo y azufre, por lo que las nuevas tablas correspondientes a esos últimos puentes se encuentran al final de este ANEXO I.

Este ANEXO I se complementa con el ANEXO II, en el que se encuentran los *Refcodes* de los complejos encontrados.



## **ANEXO II**

### ***REFCODES***

#### ***Capítulo 2. Búsqueda inicial***

---

**NOTA.-** este ANEXO II se complementa con el ANEXO I, en el que se encuentran todas las búsquedas realizadas en el proyecto.





**ANEXO III**

***TIPOLOGÍA IÓNICA***  
***Capítulo 3. Estudio iónico***



## *Referencias bibliográficas*

# ÍNDICE

|  |         |
|--|---------|
|  <b>CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN A LA CSD</b> ..... | Pág. 1  |
| 1.1. Objetivos del proyecto.....   | Pág. 2  |
| 1.2. El Centro de Datos Cristalográficos de Cambridge.....   | Pág. 3  |
| 1.3. La CSD: la mayor base de datos cristalográficos del mundo.....  | Pág. 8  |
| 1.4. Programas auxiliares de la CSD.....   | Pág. 11 |
| 1.5. Publicación y validación de estructuras.....  | Pág. 21 |
| 1.6. Aplicaciones de la CSD.....   | Pág. 24 |
| 1.6.1. <i>Introducción</i> .....   | Pág. 24 |
| 1.6.2. <i>Aplicaciones a la química inorgánica molecular</i> .....   | Pág. 26 |
| 1.6.2.1. <i>Dimensiones moleculares a partir de los datos de rayos X en monocristales y su fiabilidad</i> .....                  | Pág. 26 |
| 1.6.2.2. <i>Modelos de estructura y enlace</i> .....   | Pág. 29 |
| 1.6.2.3. <i>Modelos cuantitativos</i> .....  | Pág. 31 |
| 1.6.2.4. <i>Análisis del camino de la reacción</i> .....   | Pág. 34 |
| 1.6.2.5. <i>Análisis conformacional</i> .....  | Pág. 36 |
| 1.6.2.6. <i>Interacciones intermoleculares en cristales</i> .....  | Pág. 37 |
| 1.6.2.7. <i>Grupos espaciales y empaquetamiento molecular</i> .....  | Pág. 40 |
| 1.6.3. <i>Aplicaciones a la química orgánica y cristalina</i> .....  | Pág. 41 |
| 1.6.3.1. <i>Modelos estructurales sistemáticos y estadísticos</i> .....  | Pág. 41 |
| 1.6.3.2. <i>Interacciones intermoleculares</i> .....   | Pág. 42 |
| 1.6.3.3. <i>Enlace de hidrógeno</i> .....  | Pág. 44 |
| 1.6.3.4. <i>Interacciones en las que no media el hidrógeno</i> .....   | Pág. 45 |
| 1.6.3.5. <i>Ingeniería cristalina</i> .....  | Pág. 47 |
| 1.6.3.6. <i>Polimorfismo y pseudo-polimorfismo</i> .....   | Pág. 48 |
| 1.6.3.7. <i>Predicción de la estructura cristalina</i> .....   | Pág. 49 |
| 1.6.3.8. <i>Determinación de la estructura a partir de datos de polvo</i> .....  | Pág. 50 |
| 1.6.3.9. <i>Análisis de la precisión estructural</i> .....   | Pág. 51 |
|  <b>CAPÍTULO II. BÚSQUEDA INICIAL</b> .....   | Pág. 52 |
| 2.1. Introducción a los complejos de los metales de transición.....  | Pág. 53 |
| 2.2. Condiciones iniciales de la búsqueda.....   | Pág. 60 |
| 2.3. Preparación de la búsqueda en la CSD.....   | Pág. 62 |
| 2.4. Resultados obtenidos.....   | Pág. 71 |

|          |  |          |
|----------|--|----------|
| <b>✚</b> | <b>CAPÍTULO III. ESTUDIO IÓNICO</b> .....  | Pág. 73  |
| 3.1.     | Consideraciones iniciales para el estudio iónico.....  | Pág. 74  |
| 3.2.     | Proporciones iónicas.....  | Pág. 76  |
|          | 3.2.1. <i>Complejos homodinucleares de paladio</i> .....   | Pág. 77  |
|          | 3.2.2. <i>Complejos homodinucleares de platino</i> .....   | Pág. 79  |
|          | 3.2.3. <i>Complejos homodinucleares con doble puente de cloro</i> .....  | Pág. 81  |
|          | 3.2.4. <i>Complejos homodinucleares con doble puente de azufre</i> .....   | Pág. 83  |
| 3.3.     | Análisis iónico.....   | Pág. 84  |
|          | 3.3.1. <i>Iones en complejos homodinucleares de paladio</i> .....  | Pág. 85  |
|          | 3.3.2. <i>Iones en complejos homodinucleares de platino</i> .....  | Pág. 88  |
|          | 3.3.3. <i>Iones en complejos homodinucleares doble con puente de cloro</i> .....   | Pág. 90  |
|          | 3.3.4. <i>Iones en complejos homodinucleares con doble puente de azufre</i> .....  | Pág. 92  |
|          | 3.3.5. <i>Iones más comunes en los complejos obtenidos</i> .....   | Pág. 94  |
| <b>✚</b> | <b>CAPÍTULO IV. ESTUDIO CONFORMACIONAL DE COMPLEJOS SELECCIONADOS</b> .....  | Pág. 97  |
| 4.1.     | Selección de complejos. Objetivo del estudio.....  | Pág. 98  |
| 4.2.     | Complejos homodinucleares plano-cuadrados de níquel con doble puente de azufre y con tetraetilamonio como contraión..... | Pág. 99  |
|          | 4.2.1. <i>Determinación de los parámetros geométricos</i> .....  | Pág. 99  |
|          | 4.2.2. <i>Resultados obtenidos. Análisis estadístico</i> .....   | Pág. 106 |
|          | 4.2.3. <i>Estudio de la posición del contraión respecto al complejo metálico</i> .....                                   | Pág. 110 |
| <b>✚</b> | <b>CAPÍTULO V. CONCLUSIONES</b> .....  | Pág. 114 |
| <b>✚</b> | <b>ANEXO I. Resultado de la búsqueda (Capítulo 2. Búsqueda inicial)</b> .....  | Pág. 118 |
| <b>✚</b> | <b>ANEXO II. Refcodes (Capítulo 2. Búsqueda inicial)</b> .....   | Pág. 141 |
| <b>✚</b> | <b>ANEXO III. Tipología iónica (Capítulo 3. Estudio iónico)</b> .....  | Pág. 157 |
| <b>✚</b> | <b>Referencias bibliográficas</b> .....  | Pág. 177 |
| <b>✚</b> | <b>Agradecimientos</b> .....   | Pág. 187 |