

ÍNDICE

	Página
I.- INTRODUCCIÓN.....	1
I.1.- Complejos de Níquel(II) con ligandos Fósforo–1,1–Ditiolato.....	1
I.2.- Complejos de Ditiofosfato y Ditiofosfonato de Níquel(II) que contienen el macrociclo $[Ni([12]ANO N_3)]^{2+}$	1
I.3.- Complejos de Níquel(II) pentacoordinado con doble puente de ligandos Éster Fosfato o fosfinato.....	2
I.4.- Simetría	9
I.5.- Ángulos de torsión.....	21
I.6.- Objetivos y estructuración del trabajo.....	24
II.- METODOLOGÍA	26
II.1.- Medios a utilizar.....	26
II.1.1.- Base de Datos CSD	26
II.1.1.1.- Programa <i>ConQuest</i>	27
II.1.1.2.- Programa <i>Mercury</i>	30
II.1.2.- Programas específicos	31
II.1.2.1.- Implementación en Excel de un algoritmo estadístico de clasificación de conformaciones de <i>n</i> miembros.....	31
II.1.2.2.- Método para asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas.....	34
II.1.3.- Las 10 conformaciones del ciclooctano generadas por el programa <i>Hyperchem</i>	40
II.2.- Selección de las estructuras.....	43

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN	45
III.1.- Aplicación de los programas específicos a los compuestos	
Seleccionados.....	45
III.2.- Criterios utilizados	49
III.2.1.- Metales.....	49
III.2.2.- Conformación.....	54
III.3.- Deformación de las estructuras.....	59
III.3.1.- Relación entre deformación y conformación.....	59
III.3.2.- Relación entre deformación y metales.....	62
III.4.- Distancias de enlace.....	65
III.4.1.- Distancia hierro-hierro <i>versus</i> conformaciones.....	67
III.4.2.- Distancias P-O	68
III.4.3.- Distancias Fe-O del anillo	70
III.4.4.- Distancias del puente Fe-X-Fe (X = O, F)	70
IV.- CONCLUSIONES	72
V.- BIBLIOGRAFÍA.....	74
APÉNDICES.....	76