

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

III.1.- APLICACIÓN DE LOS PROGRAMAS ESPECÍFICOS A LOS COMPUESTOS SELECCIONADOS

Como ya se expuso anteriormente, el Departamento de Química Inorgánica y el profesor Kessler han elaborado unos programas específicos aplicados al estudio de las conformaciones de anillos de n átomos. En este proyecto el valor de n siempre será de 8 ya que ambos programas se aplicarán para fragmentos con este número de átomos. Al utilizar estos programas para los 409 compuestos seleccionados (1078 fragmentos), se obtienen los resultados que se recogen en el Apéndice 2.

Las coincidencias entre ambos son 897 (83.2%), de las cuales 518 han sido resueltas con la máxima probabilidad, 338 con una segunda conformación probable y 41 en las que se necesitan tres e incluso más estructuras.

En estudios similares, también presentados como Proyectos Fin de Carrera, para complejos dinucleares con doble puente de fosfonatos y complejos dinucleares con doble puente de fosfinatos, las coincidencias eran del 81.2% en ambos casos, valor similar al obtenido para los fosfatos. Los porcentajes para la resolución de las tres funciones se recogen en la Tabla 7.

Tabla 7.- Número de estructuras resueltas y porcentaje de en función de la probabilidad para las tres funciones químicas

	Coincidencias (%)	Probabilidad 1ª	Probabilidad 1ª-2ª	Probabilidad 1ª-2ª-3ª
Puentes O–P–O (fosfatos)	897 (83.2%)	518 (57.7%)	338 (37.7%)	41 (4.6%)
Puentes O–P–O (fosfonatos)	414 (81.2%)	217 (42.6%)	245 (48.0%)	48 (9.4%)
Puentes O–P–O (fosfinatos)	112 (81.2%)	66 (58.9%)	34 (30.4%)	12 (10.7%)

Se puede comprobar que, aunque en este proyecto el número de fragmentos es más alto, han aumentado las coincidencias y, en consecuencia, disminuido el porcentaje de discrepancias. Es posible que al ser menor el número de fragmentos resueltos con la tercera probabilidad aumente el porcentaje de coincidencias.

Se resuelven con elevado porcentaje las que sólo necesitan un valor de probabilidad (57.7%, similar a los fosfinatos y mayor que los fosfonatos), desciende a un tercio cuando aparecen dos valores como probables (37.7%, mayor que los fosfinatos y menor que los fosfonatos) y disminuye drásticamente para tres o más configuraciones (4.6%, bastante menor que los fosfonatos y fosfinatos).

Las coincidencias entre ambos programas, que permiten valorar muy positivamente al segundo de ellos, se manifiestan en los casos en que es necesaria la utilización de más de una configuración, es decir, para aquellos que no se resuelven con probabilidad 1.0000.

Hay 339 casos en los que la segunda probabilidad tiene un valor significativo.

En la Tabla 8 se recogen ordenados los 21 casos en los que el primer valor de probabilidad es inferior a 0.8000.

Refcode	Profesor Kessler		Área Química Inorgánica	
	Prob. 1	Prob. 2	1ª	2ª
ACAVUC	B 0.5122	S 0.4878	B 68	S 68
PPOSMG	S 0.5237	B 0.4763	S 116	B 116
CAJFAU	CC 0.5265	TCC 0.4735	CC 110	TCC 110
QAMMAS	B 0.5320	S 0.4680	B 120	S 120
QATNII	TCC 0.5474	CC 0.4526	TCC 101	CC 101
LEXROV	CC 0.5516	TCC 0.4484	CC 114	TCC 114
GIXCEV	TBC 0.5569	C 0.4431	TBC 79	C 80
QOFKOL	C 0.5635	TC 0.4365	C 79	TC 80
QAXRIQ	TCC 0.5798	CC 0.4202	TCC 123	CC 123
POXMEU	C 0.5884	TC 0.4116	C 96	TC 96
MECLEL	TCC 0.6489	CC 0.3511	TCC 53	CC 55
HOGCAH	CC 0.6557	TCC 0.3443	CC 48	TCC 49
PEKKIZ	TBC 0.6709	C 0.3291	TBC 85	C 86
OCEFEH	C 0.6721	TBC 0.3279	C 80	TBC 80
GOSRIP	S 0.6756	B 0.3244	S 88	B 89
MEJGEN	TCC 0.6879	CC 0.3121	TCC 47	CC 49
BIQFOW	TC 0.7063	C 0.2937	TC 69	C 70
NIQGOJ	C 0.7141	TC 0.2859	C 47	TC 49
GIQGES	TCC 0.7435	CC 0.2565	TCC 57	CC 59
FINHIT	C 0.7581	TC 0.2419	C 113	TC 114
LOKMED01	TC 0.7775	C 0.2225	TC 48	C 51

Tabla 8

Los valores de las deformaciones son iguales o muy similares pero conforme va aumentando el valor de la primera probabilidad comienzan a ser más diferentes.

Hay 42 casos en los que la tercera probabilidad tiene un valor significativo.

Los casos más relevantes que presentan tercera probabilidad están resumidos en la Tabla 9:

Número de casos	Estructuras posibles
9	CC – TCC – CR
6	TCC – CC – CR
5	B – BB – S
5	CR – CC – TCC
4	CR – TCC – CC
3	TBC – C – TC

Tabla 9

Es de resaltar que una de ellas, la estructura de *refcode* ZZZMGI01, se resuelve mediante 7 valores de probabilidad:

TBC	0.63238467
C	0.27396032
TC	0.08759052
B	0.00359493
BC	0.00203208
BB	0.00039634
S	0.00004114

En la Tabla 10 se recogen los 42 casos que presentan tres o más probabilidades:

Refcode	Profesor Kessler			Área de Química Inorgánica		
	Prob.1	Prob. 2	Prob. 3	1 ^a	2 ^a	3 ^a
BIQFOW	B 0.8699	BB 0.1099	S 0.0202	B 146	BB 148	S 149
BUQCIZ*	TCC 0.8477	CR 0.1478	CC 0.0043	TCC 140	CR 142	CC 144
COQMIE	CR 0.9457	CC 0.0353	TCC 0.0190	CR 45	CC 49	TCC 51
COQMIE	CR 0.9457	CC 0.0353	TCC 0.0190	CR 45	CC 49	TCC 51
COQMIE	TCC 0.9960	CC 0.0026	CR 0.0014	TCC 53	CC 64	CR 66
COQMIE	CR 0.6425	CC 0.2923	TCC 0.0612	CR 62	CC 62	TCC 64
COQMIE	TCC 0.9961	CC 0.0025	CR 0.0014	TCC 53	CC 64	CR 67
COQMIE	CR 0.6465	CC 0.2923	TCC 0.0612	CR 62	CC 62	TCC 64
CUHCIR	CC 0.6728	TCC 0.3149	CR 0.0123	CC 91	TCC 92	CR 97
CUHCIR	CC 0.9419	TCC 0.0572	CR 0.0009	CC 54	TCC 59	CR 68
DOZFUT10	B 0.8915	BB 0.0983	S 0.0102	B 156	BB 157	S 159
DOZFUT10	B 0.8915	BB 0.0983	S 0.0102	B 147	BB 149	S 150
EFABAO	CC 0.8148	TCC 0.1850	CR 0.0002	CC 43	TCC 46	CR 62
FEPQEW	CC 0.7460	TCC 0.2481	CR 0.0059	CC 23	TCC 27	CR 42
GIQGES01	TCC 0.9905	CC 0.0094	CR 0.0001	TCC 52	CC 60	CR 69
GIQGES01	TCC 0.9680	CC 0.0181	CR 0.0139	TCC 62	CC 69	CR 70
GIQGES01	TCC 0.9961	CC 0.0034	CR 0.0005	TCC 63	CC 72	CR 76
GOSRIP	TBC 0.9530	C 0.0462	TC 0.0008	TBC 75	C 80	TC 85
HOGCAH	TC 0.9919	TBC 0.0051	C 0.0030	TC 101	TBC 105	C 106
KAFHAA	BC 0.9008	TBC 0.0968	C 0.0024	BC 314	TBC 360	C 362
LEHZAZ	CR 0.9533	TCC 0.0254	CC 0.0213	CR 56	TCC 60	CC 60
LEHZAZ	TBC 0.8887	C 0.1092	TC 0.0021	TBC 109	C 111	TC 115
LEHZAZ10	CR 0.9533	TCC 0.0254	CC 0.0213	CR 56	TCC 60	CC 60
LEHZAZ10	TBC 0.8887	C 0.1092	TC 0.0021	TBC 109	C 111	TC 115
LEXRUB	CC 0.8191	TCC 0.1803	CR 0.0006	CC 35	TCC 39	CR 55
LEXRUB10	CC 0.8217	TCC 0.1778	CR 0.0005	CC 35	TCC 39	CR 55
LEYCAT	BC 0.9938	TBC 0.0057	TC 0.0005	BC 314	TBC 361	TC 362
LIVKUW	CC 0.9383	TCC 0.0346	CR 0.0271	CC 44	TCC 51	CR 54
MEQHOF	TBC 0.9994	TC 0.0005	BC 0.0001	TBC 103	TC 111	BC 124
MEWWUG	B 0.8915	BB 0.0983	S 0.0102	B 155	BB 156	S 158
NATMUQ	CR 0.9224	CC 0.0619	TCC 0.0157	CR 63	CC 65	TCC 65
QADSUJ	TCC 0.5176	CR 0.3746	CC 0.0778	TCC 65	CR 67	CC 68
QAJKOB	TCC 0.7425	CC 0.1857	CR 0.0718	TCC 58	CC 61	CR 64
QATNII*	S 0.9717	CC 0.0144	TCC 0.0126	S 134	CC 137	TCC 137
QAXREM	C 0.8944	TC 0.1051	TBC 0.0005	C 97	TC 99	TBC 104
QOXGAL	B 0.8824	BB 0.1066	S 0.0110	B 158	BB 159	S 160
REBSUM	CC 0.6286	TCC 0.3660	CR 0.0054	CC 50	TCC 51	CR 61
SIBMOF	S 0.9974	TCC 0.0015	B 0.0011	S 136	TCC 140	B 141
SINVAM	CC 0.9907	TCC 0.0091	CR 0.0002	CC 30	TCC 43	CR 54
WAVQUF	CR 0.9980	TCC 0.0013	CC 0.0007	CR 84	TCC 90	CC 91
WAVQUF	CR 0.8200	TCC 0.1593	CC 0.0207	CR 78	TCC 78	CC 80
ZZZMGI01*	TBC 0.6324	C 0.2740	TC 0.0876	BC 155	C 160	TBC 160

*Resuelto con más de tres probabilidades

Tabla 10

Las discrepancias son un total de 181 (16.8%) y se recogen, agrupadas, en la Tabla 11:

Probabilidad 1	Probabilidad 2	Probabilidad 3
BC	TBC – BC	TCC – CR – CC
CC	BC – CC	B – TCC – BC
TCC	BC – B	CR – TCC – CC
S	TC – C	BC – TCC – CC
	BC – TCC	BB – CC – BC
	CC – BC	TBC – CC – C
	BC – TBC	BC – TCC – B
	TCC – BC	S – BC – B
	B – BC	CR – CC – TCC
	S – B	TBC – BC – C
	TBC – C	B – BC – S
	C – TBC	TC – TBC – C
	TCC – BC	CC – BB – BC
	BC – BB	BB – BC – S
	TBC – B	B – CR – BC
	B – S	C – TBC – TC
	BC – S	BC – TBC – C
	BC – TBC	BC – B – S
	C – TC	BC – S – B
		CC – TCC – BC
		TCC – B – BC
		TBC – BC – TC
		BB – S – BC
		TCC – BC – B
		B – BC – TCC
		BC – B – TCC
		TC – C – BC
		TBC – C – TC
		S – BB – BC
		B – BB – S

Tabla 11

Éstas se pueden dividir en dos grupos:

- Grupo 1- Discrepancias pequeñas. Se incluyen aquellas que se han resuelto en segunda o tercera probabilidad. Hay una gran variedad dentro de este tipo: ACUBAB-1, ALPETT-1, etc.
- Grupo 2- Discrepancias grandes. Se incluyen aquellas que no se han resuelto en segunda y en tercera probabilidad, siendo necesario utilizar sucesivas probabilidades para su resolución: CUHCIR-2, DASDUW10, etc

III.2.- CRITERIOS UTILIZADOS

Una vez aplicados los programas específicos a los 409 compuestos seleccionados vamos a utilizar diversos criterios y a establecer posibles relaciones entre ellos: metales, conformaciones (estructura) y grado de deformación de las mismas.

III.2.1.- Metales

Cabe destacar la gran variedad de metales presentes en las conformaciones. Hay hasta un total de 32, de casi todos los grupos de la tabla periódica, siendo los más abundantes cinc, aluminio, galio, vanadio y hierro.

En la página siguiente, sobre fondo de color magenta, verde y azul resaltamos los elementos químicos que aparecen en las conformaciones de ocho miembros con puentes O–P–O de fosfatos, fosfonatos y fosfinatos, respectivamente.

En comparación con el estudio de los fosfonatos resalta la ausencia de metales importantes como plomo y bismuto. También cabe señalar la no presencia de metales menos conocidos como itrio, niobio y tántalo. En comparación con los fosfinatos es de reseñar la ausencia de metales importantes como paladio, plata, cromo y plomo, y algunos lantánidos. El único actínido presente en los tres estudios es el uranio. El oro está ausente en todos los casos.

En los fosfatos hay compuestos de litio, berilio, renio, rutenio, rodio e indio, ausentes en los fosfonatos; sin embargo, ambos estudios presentan el mismo número de lantánidos. En los fosfonatos están presentes metales como el plomo, bismuto, wolframio, tántalo y niobio, que no lo están en los fosfatos. Hay similitud en la presencia de compuestos heterodinucleares. Así, en los fosfatos encontramos 22 compuestos heterodinucleares de los que 4 de ellos son también homodinucleares (*refcode* HOGCAH, IFAHEC, QUFGED y QUFGIH). En los fosfonatos hay 7 compuestos heterodinucleares.

En los fosfinatos encontramos compuestos de paladio, plata y plomo, los cuales no están presentes en los fosfatos. Además, hay un mayor número de lantánidos (7 frente a 3). Sin embargo en los fosfatos encontramos compuestos de los metales de los grupos 1 y 2 que no están en los fosfinatos. Otra gran diferencia, es que en estos últimos no hay ningún compuesto heterodinuclear.

Metales presentes en los fragmentos O–P–O de fosfato, fosfonato y fosfinato

1																	18		
H																	He		
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq					
			* Lantánidos																
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			# Actínidos																
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Ek	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

1																	18		
H																	He		
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq					
			* Lantánidos																
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			# Actínidos																
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Ek	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

1																	18		
H																	He		
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	#	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub		Uuq					
			* Lantánidos																
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			# Actínidos																
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Ek	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

En la Tabla 12 se recogen los 22 fosfatos heterodinucleares, indicando entre paréntesis el número de fragmentos.

<i>Refcode</i>	Metales	<i>Refcode</i>	Metales
EBARII (1)	Cu – V	QOSSOG (1)	Fe – Zn
HOGCAH (20)	Na – Al	QUFGED (2)	Al – Mg
IFAHEC (10)	Zn – Ga	QUFGIH (2)	Al – Mg
LEXRIP (3)	V – Mg	RITJUZ (3)	Ba – V
LEXRIP 10 (3)	V – Mg	RITKAG (3)	Ca – V
MEQHOF (4)	Mo – Cd	RITKIO (2)	Mn – V
MEQJAT (2)	Mo – Cd	TACZUS (1)	Fe – Zn
MEQJEX (2)	Mo – Zn	TUFXIB (4)	Mn – Mo
MOGYUC (2)	Mo – Zn	XICDOC 01 (1)	Zn – V
MOJZEQ (3)	Ga – V	YIKQIS (6)	Mo – Fe
QOPDEE (2)	Zn – Ga	ZUZHIL (4)	Co – Mo

Tabla 12

En las páginas siguientes se recoge el número de compuestos y porcentaje que presenta cada metal en la Tabla 13, el número y porcentaje de fragmentos en la Tabla 14 y los datos se resumen en Tabla 15.

Tabla 13 .- Metales, número de compuestos que presentan cada metal y porcentaje

METALES	NÚMERO DE COMPUESTOS	% DE COMPUESTOS	METALES	NÚMERO DE COMPUESTOS	% DE COMPUESTOS
Zn	76	18.54	Be	3	0.73
Al	75	18.29	In	3	0.73
Ga	42	10.24	Mg	3	0.73
V	36	8.78	La	2	0.49
Fe	30	7.32	Cd	2	0.49
Mo	22	5.37	Ca	2	0.49
Co	18	4.39	Rh	1	0.24
Zr	13	3.17	Re	1	0.24
Ti	12	2.93	Na	1	0.24
Cu	9	2.20	Ru	1	0.24
Sn	7	1.71	Pr	1	0.24
Mn	7	1.71	Ce	1	0.24
U	7	1.71	Li	1	0.24
Pt	5	1.22	K	1	0.24
Ni	5	1.22	Cs	1	0.24
Sb	4	0.98			

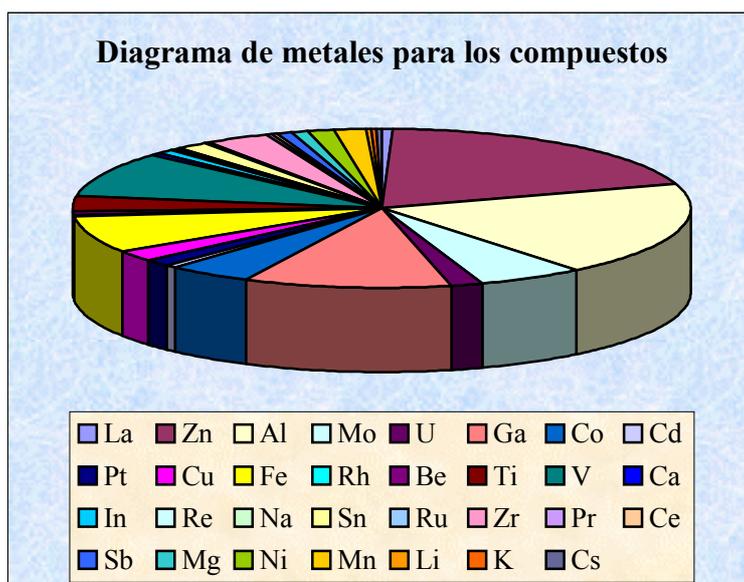
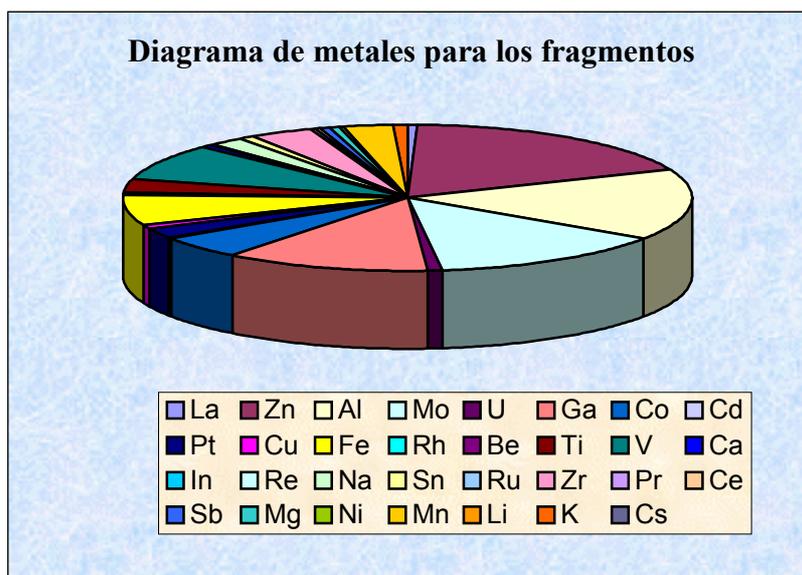


Tabla 14 .- Número y porcentaje de fragmentos que presenta cada metal

METALES	NÚMERO DE FRAGMENTOS	% DE FRAGMENTOS	METALES	NÚMERO DE FRAGMENTOS	% DE FRAGMENTOS
Zn	184	17.05	K	7	0.65
Al	164	15.20	Be	6	0.56
Mo	139	12.88	Ca	5	0.46
Ga	120	11.12	Sb	5	0.46
V	84	7.78	Mg	5	0.46
Fe	68	6.30	Ni	5	0.46
Co	52	4.82	In	3	0.29
Zr	36	3.34	Pr	3	0.29
Ti	29	2.69	Ce	3	0.29
Mn	27	2.50	Cd	2	0.19
Pt	22	2.04	Rh	2	0.19
Na	20	1.85	Re	1	0.09
U	10	0.93	Ru	1	0.09
Cu	9	0.83	Li	1	0.09
Sn	9	0.83	Cs	1	0.09
La	7	0.65			



En la Tabla 15 se refleja la cantidad y porcentaje de los metales y fragmentos más abundantes. En general, se duplica e incluso se triplica el número de fragmentos con respecto del número de compuestos, exceptuando el molibdeno, que presenta un promedio de 6 fragmentos por compuesto.

Tabla 15.- Número y porcentaje de fragmentos *versus* metales

Compuestos (410)			Fragmentos (1078)		
Cinc	76	18.54%	Cinc	184	17.05%
Aluminio	75	18.29%	Aluminio	164	15.20%
Galio	42	10.24%	Molibdeno	139	12.88%
Vanadio	36	8.78%	Galio	120	11.12%
Hierro	30	7.32%	Vanadio	84	7.78%
Molibdeno	22	5.37%	Hierro	68	6.30%
Cobalto	18	4.39%	Cobalto	52	4.82%
Zirconio	13	3.17%	Zirconio	36	3.34%
Titanio	12	2.93%	Titanio	29	2.69%
Cobre	9	2.20%	Manganeso	27	2.50%
Estaño	7	1.71%	Platino	22	2.04%
Manganeso	7	1.71%	Sodio	20	1.85%
Uranio	7	1.71%	Uranio	10	0.93%
Platino	5	1.22%	Cobre	9	0.83%
Níquel	5	1.22%	Estaño	9	0.83%
Antimonio	4	0.98%	Lantano	7	0.65%

Los 9 compuestos de cobre son de un solo fragmento, lo que convierte a este metal en candidato a la hora de realizar cualquier estudio, por la ausencia de complicaciones derivadas del alto número de fragmentos por compuesto. Este es un punto de similitud con los fosfonatos y fosfinatos, ya estudiados.

En este aspecto, resalta de forma espectacular el único compuesto que hay de sodio, de *refcode* HOGCAH, ya citado como heterodinuclear, que presenta 20 fragmentos y tiene además alternancia entre los enlaces sodio-sodio y cinc-sodio.

Los metales cinc, galio, hierro, vanadio, cobalto, zirconio y titanio mantienen su porcentaje, el aluminio baja algo y el molibdeno lo duplica. En el cobre baja el porcentaje pero lo relevante es que cada uno de sus compuestos sólo presenta un fragmento.

III.2.2.- Conformaciones

En el Apéndice 2 se recogen las conformaciones que presentan los 1078 fragmentos de los 409 compuestos seleccionados.

Como ya hemos citado, los resultados obtenidos al aplicar los dos programas específicos a todos los fragmentos no coinciden en su totalidad (83.2%). En los gráficos que se adjuntan en las páginas siguientes se pueden observar mejor las diferencias existentes entre ambos estudios.

En la Tabla 16 y gráficos de la página siguiente, se recogen las conformaciones más probables de todos los fragmentos para cada uno de los programas.

Tabla 16. Número y porcentaje de la configuración más probable para cada uno de los 1078 fragmentos seleccionados

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
Profesor Kessler	13 1.21%	83 7.70%	67 6.21%	115 10.67%	157 14.56%	131 12.15%	122 11.32%	78 7.24%	245 22.73%	67 6.21%	1078 100%
Área Q. Inorg.	9 0.84%	96 8.91%	81 7.51%	122 11.32%	153 14.19%	132 12.24%	142 13.17%	90 8.35%	158 14.66%	95 8.81%	1078 100%

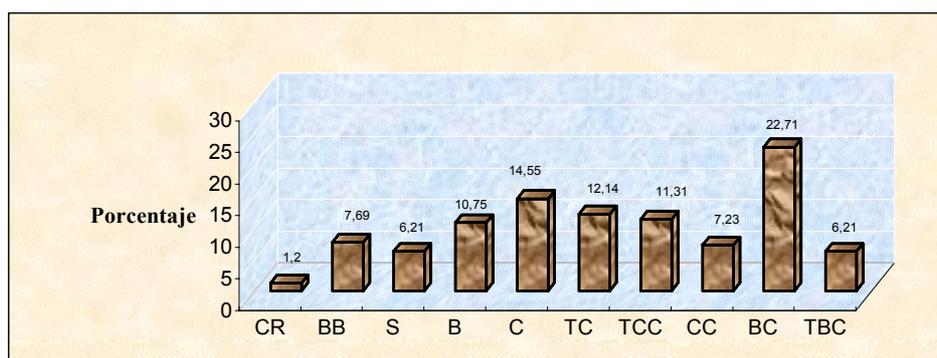
Al comparar los programas, nos encontramos con los siguientes resultados:

- la conformación más abundante es la **boat chair** presente en 245 fragmentos (22.73%) según el profesor Kessler, mientras que para el programa del Área de Química Inorgánica, esta conformación está presente sólo en 158 fragmentos (14.66%).
- las conformaciones **crown**, **boat boat**, **boat**, **chair** y **twist chair** tienen aproximadamente el mismo número de fragmentos.
- Las discrepancias en las conformaciones son:
 - En la **boat chair** existe una diferencia de 87 fragmentos que representan el 8.07% del total.
 - En la **twist boat chair** existe una diferencia de 28 fragmentos que representan el 2.60%.
 - En la **twist chair chair** existe una diferencia de 20 fragmentos que representan el 1.86%.

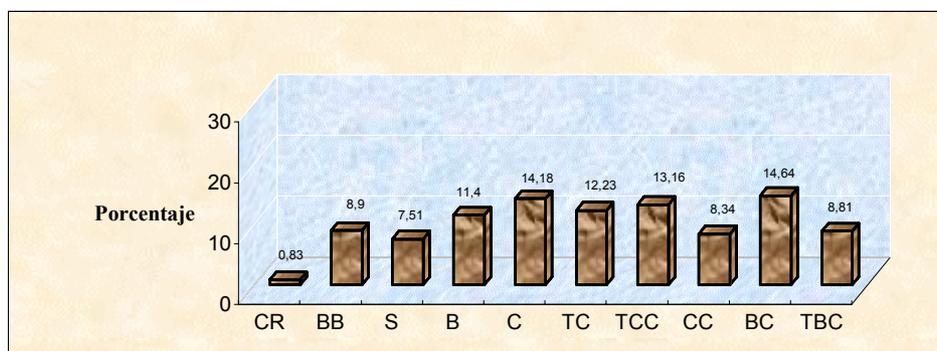
- En la *sofa* existe una diferencia de 14 fragmentos que representan el 1.30%.

La diferencia entre estos resultados queda minimizada al observar que, en muchos casos, los valores de las deformaciones halladas para la segunda y tercera probabilidad varían muy poco con respecto a la de la primera.

Puente O-P-O (Profesor Kessler)



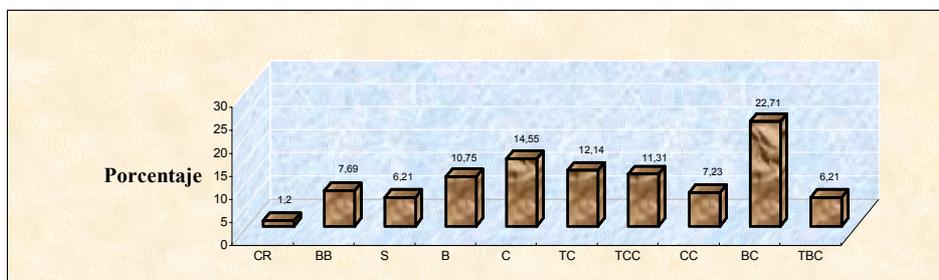
Puente O-P-O (Área de Química Inorgánica)



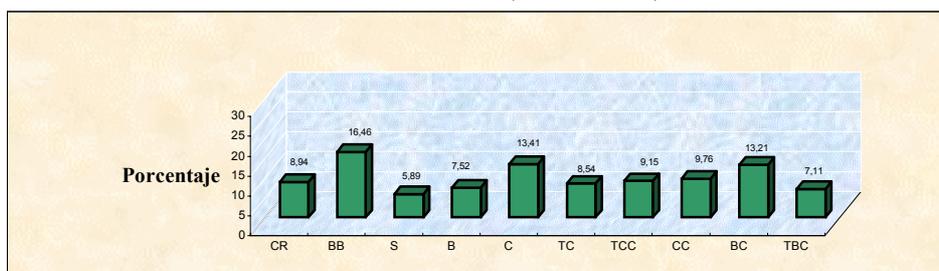
Existen fragmentos de las 10 configuraciones teóricas. La más abundante es la *boat chair* (22.73%). Este resultado no debe sorprender *a priori* ya que para el ciclooctano la configuración más estable es la *boat chair*⁴⁷ como se puede observar en la página siguiente en el diagrama de energías que se ofrece junto con los gráficos de las tres funciones químicas. Le siguen en orden de abundancia la *chair* (14.55%) y la *twist chair* (12.14%), que sin embargo son de las configuraciones más energéticas para el ciclooctano. La *twist chair chair* (11.31%), es la segunda más estable después de la *boat boat*. La *boat* (10.75%) es la menos estable de todas. El resto de las conformaciones tienen una abundancia poco significativa para poder realizar comparaciones.

Como resumen podemos decir algo que se repite para los otros estudios realizados para fosfonatos y fosfinatos: la estabilidad de estas conformaciones debe ser diferente de las teóricas del ciclooctano a la luz de los resultados experimentales observados, por lo que sugerimos que se profundice en el cálculo de energías para las mismas.

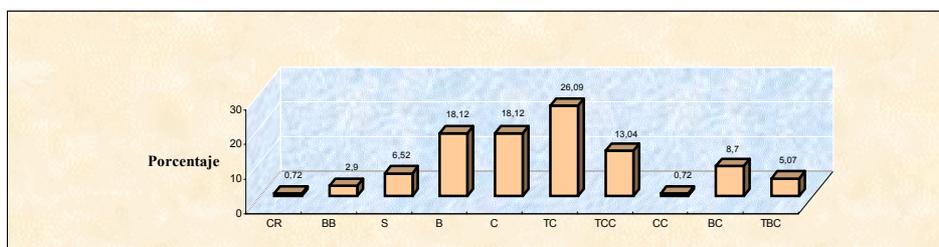
Puente O-P-O (fosfatos)



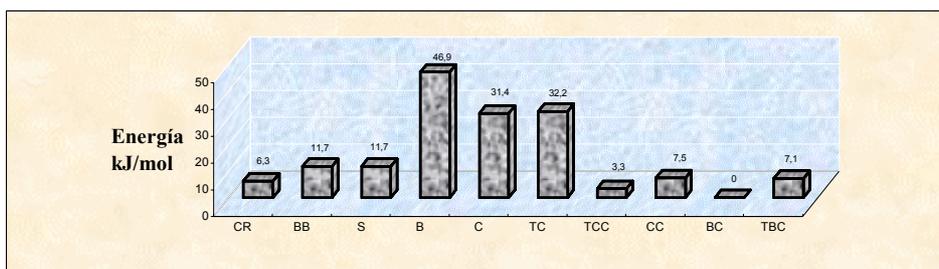
Puente O-P-O (fosfonatos)



Puente O-P-O (fosfinatos)



Energía de las conformaciones del ciclooctano (kJ/mol)



No obstante, nuestros datos contrastan con los obtenidos en el estudio de los fosfonatos, en el que la conformación más abundante era la *boat* con un 16.46% del total de fragmentos, seguida de la *chair* y la *boat chair* con 13.41% y 13.21%, respectivamente, que tampoco coincide con lo esperado para el ciclooctano. Lo mismo sucede para los fosfinatos, cuyos resultados son distintos a los anteriores.

Si utilizamos los resultados obtenidos para los tres estudios observamos que:

- La distribución de las conformaciones en los mismos es muy diferente, como cabría esperar por tratarse de funciones químicas distintas.
- Las conformaciones más abundantes, globalmente, son *boat chair*, *twist chair* y *chair*.

Además, podemos añadir que la casuística en los anillos de ocho miembros estudiados para las tres funciones químicas es muy variada:

- Deformación de las estructuras.
- Diferente número de coordinación para un mismo metal.
- Enlaces en el interior del anillo, etc.

III.3.- DEFORMACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS

Dado el elevado número de fragmentos y con el objetivo de hacer más factible el estudio de la deformación respecto a las 10 estructuras teóricas del ciclooctano, hemos seleccionado la primera serie de transición, que presenta un total de 97 compuestos de un solo fragmento, entre los cuales no encontramos ninguna estructura de escandio y cromo.

Tabla 17.- Refcode, conformación y deformación de los 97 compuestos seleccionados

<i>Refcode</i>	<i>Configuración</i>	<i>Refcode</i>	<i>Configuración</i>	<i>Refcode</i>	<i>Configuración</i>
ATPZN10	C 56	PAQPIG	TC 52	TOQCIL	TBC 34
BORFAP	TC 25	PIMTAG	BB 124	VADKEQ	C 64
CUMPAH10	C 48	PIQGAX	BB 87	VIRQES	C 55
DASDUW	BB 130	PITMIO	BB 115	WEXQUL	TBC 55
DASDUW 10	BB 130	PITMOU	BB 93	WOGHOP	TBC 101
FEBYOA 20	C 39	QAMLIZ	C 55	WOGHUV	S 100
GARKIT	BB 56	QAMLOF	TC 71	WOQYUW	TBC 97
GMPCUP	C 49	QAMMOG	C 45	WOWGUK	BB 56
HOPYEQ	TBC 106	QAMMUM	TC 38	XACPEW	TBC 94
IBOSAT	C 56	QAXPOU	CC 11	XACPOG	BB 64
JAGRUE	C 48	QAXQAH 01	B 50	XAKCUH	C 70
JAGSAL	C 42	QAXRUC	B 49	YOMTAV	BC 128
JAGSEP	C 51	QAXWIV	TC 75	ZEHBUJ	C 78
JUXYEG	S 93	QECPAC	BC 85	ZEHBUJ 01	C 79
KEDGIJ	BB 99	QECPIX01	TC 34	ZIMVOG	S 128
KINMID	C 35	QECPIX 02	TC 34	ZIMVUM	BB 123
LEPGA0	TC 62	QIWDOP	BC 132	ZOTHUL	C 39
LEPKEW	C 64	QOFKOL	C 79	ZZZMGI 01	BC 155
LEXREL	TC 62	QOFYIT	TBC 81	LOXSEW	C 40
LEXREL 10	TC 62	QOMVUJ	TBC 105	MOPBAU	B 64
LISVUE	BB 60	QOSSUM	BB 99	MUHPUA	TC 46
LIVKUW	CC 44	QOSZIH	C 70	OFITUS	B 56
LOKMED	TC 48	QOXGAL	B 158	OGEMIW	C 45
LOKMED 01	TC 48	QUJCON	S 230	QOFKOL 01	C 79
MEWWUG	B 155	QUJCUT	TC 70	WOZLEC	B 125
MEXDIC	C 79	RAQVAG	TC 33	XODRIR	C 35
MEXDOI	C 63	RECROG	C 39	XORCAI	BB 45
NASBIS	C 72	SIBMOF	S 136	XOTPOL	TC 66
NEJCOU	BB 133	SIGQOO	S 115	XOXHIB	TC 83
NEJDAH	BB 125	SUZCUL	C 11	XOXHIB 01	C 46
NEPREF	BB 35	TATYAO	TC 115	ZEHBUJ 02	C 79
NOHSOS	C 40	TEMJAW	BC 135		
OFABOM	TBC 80	TILPEJ	TC 63		

III.3.1.- Relación entre deformación y conformación

En la Tabla 18 se presentan los valores de las deformaciones de los 97 compuestos seleccionados, así como el valor medio de cada una de las conformaciones encontradas.

Tabla 18

<i>ESTRUCTURAS</i>	<i>DEFORMACIONES</i>
<p style="text-align: center;">BB Deformación media → 93</p>	130
	130
	56
	99
	60
	133
	125
	35
	124
	87
	115
	93
	99
	56
	64
	123
45	
<p style="text-align: center;">S Deformación media → 134</p>	93
	230
	136
	115
	100
	128
<p style="text-align: center;">B Deformación media → 94</p>	155
	50
	49
	158
	64
	56
	125

ESTRUCTURAS	DEFORMACIONES
<p style="text-align: center;">C Deformación media → 55</p>	56
	48
	39
	49
	56
	48
	42
	51
	35
	64
	79
	63
	72
	40
	55
	45
	79
	70
	39
	11
	64
	55
	70
	78
	79
	39
	40
	45
	79
	35
46	
79	
<p style="text-align: center;">CC Deformación media → 27</p>	44
<p style="text-align: center;">TBC Deformación media → 84</p>	11
	106
	80
	81
	105
	34
	55
	101
	97
	94

<i>ESTRUCTURAS</i>	<i>DEFORMACIONES</i>
<p style="text-align: center;">TC Deformación media → 57</p>	25
	62
	62
	62
	48
	48
	52
	71
	38
	75
	34
	34
	70
	33
	115
	63
	46
66	
83	
<p style="text-align: center;">BC Deformación media → 127</p>	85
	132
	135
	128
	155

Todos los datos anteriores se resumen en la Tabla 19:

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC	Total
Deformación media	--	93	134	94	55	57	--	27	127	84	78
Número de estructuras	0	17	6	7	32	19	0	2	5	9	97

Tabla 19

No se han encontrado conformaciones de *crow* y *twist chair chair*. La deformación media de todas las estructuras es 75.

Con los datos de las deformaciones recogidos en el capítulo II:

Variación de la deformación (°)	Intervalo de valores
0 → 5	0 → 14
6 → 10	15 → 28
11 → 15	29 → 42
16 → 20	43 → 56
21 → 25	57 → 71
26 → 30	72 → 85
31 → 35	86 → 99
36 → 40	100 → 113
41 → 45	114 → 127

podemos afirmar que, desde el punto de vista de la relación deformación-conformación, “la deformación media de todas las estructuras de complejos de metales de la primera serie de transición que presentan un doble puente O–P–O de fosfato es de 31° aproximadamente”.

La estructura menos deformada y a su vez menos abundante (sólo dos fragmentos) es la *chair chair*, con una deformación de 10°. Otras conformaciones con pequeña deformación son la *chair* y la *twist chair*, cuyos valores son 20° y 21°, respectivamente. Estas dos son las conformaciones con mayor presencia.

III.3.2.- Relación entre deformación y metales

Al reducirse la muestra de 1078 fragmentos a 97, han desaparecido las configuraciones *crow*n y *twist chair chair* figurando, por tanto, sólo 8 de las 10 teóricamente posibles. El resultado, para los metales de la primera serie de transición, es:

- 6 compuestos de titanio, con 2 conformaciones distintas
- 20 de vanadio, con 7
- 3 de manganeso, con 3
- 16 de hierro, con 6
- 8 de cobalto, con 6

- 5 de níquel, con 3
- 9 de cobre, con 2
- 29 compuestos de cinc, con 7 conformaciones distintas.

El titanio presenta:

- 3 compuestos cuya configuración es *twist chair*, con una deformación media de 26°.
- 3 compuestos cuya conformación es *chair* con una deformación media de 21°.

La deformación media de todos los compuestos de titanio es 23°.

El vanadio presenta:

- 6 compuestos cuya conformación es *boat boat*, con valores de deformación bastante diferentes, siendo su valor medio de 33°.
- 6 compuestos cuya conformación es *twist chair*, con una deformación media de 24°.
- 3 compuestos cuya conformación es *chair*, con una deformación media de 17°.
- 2 compuestos cuya conformación es *boat chair*, con deformaciones altas, siendo su valor medio de 47°.
- 1 compuesto cuya conformación es *twist boat chair*, y con una deformación de 28°.
- 1 compuesto cuya conformación es *sofa*, con una deformación alta, 45°.
- 1 compuesto de conformación *boat*, con una deformación de 23°.

La deformación media de los compuestos de vanadio es 29°.

El manganeso presenta 3 compuestos con conformaciones *chair*, *twist chair* y *boat* y unas deformaciones de 20°, 25° y 45°, respectivamente, de valor medio 30°.

El hierro presenta:

- 9 compuestos cuya conformación es *boat boat*, con valores de deformación altos y parecidos, siendo su deformación media de 36°.

- 2 compuestos cuya conformación es **twist chair**, con una deformación media de 17°.
- 2 compuestos cuya conformación es **twist boat chair**, con una deformación media de 34°.
- 1 compuesto cuya deformación es **boat**, que presenta una alta deformación, aproximadamente 55°.
- 1 compuesto cuya conformación es **chair**, con un valor de deformación pequeño, aproximadamente 4°.
- 1 compuesto cuya conformación es **sofa**, siendo su deformación de 33°.

La deformación media de los compuestos de hierro es 32°.

El cobalto presenta:

- 3 compuestos cuya conformación es **chair**, con una deformación media de 22°.
- 5 compuestos que presentan las conformaciones **twist chair**, **chair chair**, **boat**, **boat chair** y **twist boat chair**, con unas deformaciones aproximadas de 9°, 16°, 20°, 30° y 34°, respectivamente.

La deformación media de los compuestos de cobalto es 22°.

El níquel presenta:

- 3 compuestos cuya conformación es **sofa**, con deformaciones altas, siendo su valor medio de 57°.
- 2 compuestos con conformaciones **chair** y **boat boat**, con deformaciones algo más pequeñas: 4° y 16°, respectivamente.

La deformación media de los compuestos de níquel es 38°.

El cobre presenta:

- 8 compuestos cuya conformación es **chair** con deformaciones muy parecidas, siendo su valor medio de 16°.
- 1 compuesto cuya conformación es **boat chair** con una deformación de 47° aproximadamente.

La deformación media de los compuestos de cobre es 19°.

El cinc presenta:

- 13 compuestos cuya conformación es **chair**, con una deformación más o menos parecida y con un valor medio de 23°.
- 6 compuestos cuya conformación es **twist chair**, con una deformación media de 16°.
- 4 compuestos cuya conformación es **boat**, con una deformación media de 36°.
- 4 compuestos cuya conformación es **twist boat chair**, con una deformación media de 29°.
- 1 compuesto cuya conformación es **sofa**, con una deformación de 36° aproximadamente.
- 1 compuesto cuya conformación es **boat chair**, con una deformación de 54° aproximadamente.
- 1 compuesto cuya conformación es **boat boat**, con una deformación de 20° aproximadamente.

La deformación media de todas las estructuras del cinc es de 25°.

Como resumen, los compuestos de cobre son los que presentan una deformación menor, 19°. El cinc, vanadio y hierro presentan deformaciones mayores: 25°, 29° y 32°, respectivamente. El que tiene mayor deformación es el níquel, 38°.

La conformación más frecuente es la **chair**, presente en 33 compuestos, con una deformación media de 19°. Le sigue en abundancia la **twist chair** con 19 compuestos y con una deformación de 20°. La **boat boat** tiene 17 compuestos y una deformación de 33°. La **twist boat chair** y **boat** presentan 8 compuestos cada una, con unas deformaciones medias de 31° y 36°. Entre las conformaciones menos abundantes están la **chair chair**, **boat chair** y **sofa** y la cuyas deformaciones son 16°, 45° y 48°, respectivamente.

En el estudio realizado para fosfinatos, previa selección de estructuras, la conformación más abundante y menos deformada era también la **chair**, 20°, para los compuestos de cobre, también los menos deformados, 16°. En segundo lugar lo ocupaba la **twist chair** con 20°. Por tanto, para estas dos conformaciones y el cobre, la coincidencia es total.

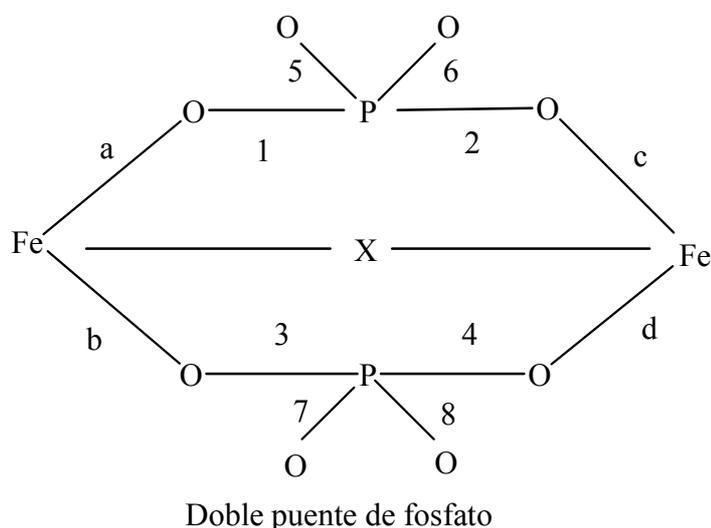
Terminamos este apartado, citando algunas estructuras llamativas como son los compuestos de *refcode* QAXPOU y SUZCUL, que presenta cada uno deformaciones de 4° aproximadamente con respecto de las conformaciones teóricas **chair chair** y **chair**.

Los compuestos que presentan los valores de deformación más altos son ZZZMGI01 y QUJCON, con 55° y 82°, respectivamente.

III.4.- DISTANCIAS DE ENLACE

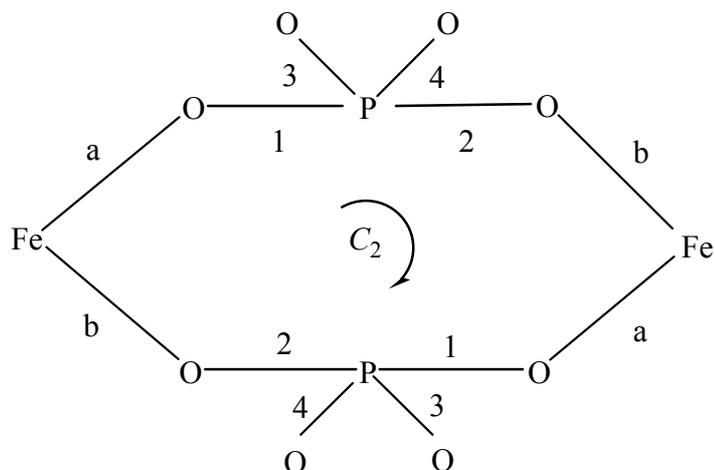
Para realizar este estudio debemos buscar un número de fragmentos significativo pero no muy elevado. Hemos seleccionado el hierro, metal que tiene 68 fragmentos para 30 compuestos, ya que no hay muchos compuestos de este metal que presenten un elevado número de fragmentos. De hecho hay 17 compuestos de 1 fragmento, 5 de 2 y 4 de 3, lo que hace un total de 26 compuestos y 39 fragmentos, número de muestras suficiente para afrontar el estudio.

En el Apéndice 3 se recogen las ocho distancias P–O, las cuatro distancias M–O, la distancia Fe–Fe y las dos distancias Fe–X (X = O, F) para los compuestos que presentan un puente entre los dos átomos de hierro. También se reflejan los datos de dos compuestos heterodinucleares de hierro y cinc (*refcode* QOSSOG y TACZUS). Las medidas se han realizado con la ayuda del programa *Mercury* y la posición de cada una de las distancias del Apéndice tienen el orden del esquema:



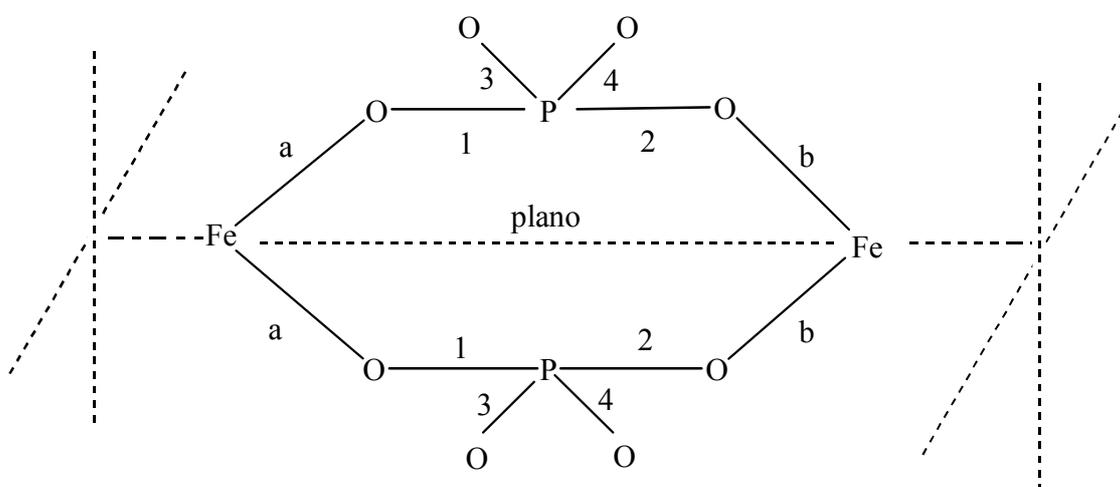
En el estudio del anillo de 8 miembros (excluyendo el puente, cuando lo hay) algunos de los fragmentos tienen las distancias iguales dos a dos. Se presentan dos casos:

a) Fragmentos con las distancias recogidas según el esquema de la figura



que tienen un eje C_2 perpendicular al anillo. Son los de *refcode* MAYFUN (2), FILQIA, SINVAM-2, MEWWUG, PITMIO, TILPEJ y XIQHIO.

b) Fragmentos que presentan las distancias según el orden del esquema



con un plano que pasa por los dos átomos del metal. Los fragmentos que presentan esta característica son: PUPYAA, SINVAM-1, QOSSUM y PIMTIO.

Los dos fragmentos de SINVAM presentan un puente Fe–O–Fe en el que las cuatro distancias Fe–O son iguales: 2.155 Å.

III.4.1.- Distancias hierro–hierro *versus* conformaciones

Las distancias para los dos complejos heterodinucleares se reflejan en la Tabla 20:

<i>Refcode</i>	QOSSOG	TACZUS
Fe–O	2.048 Å	2.031 Å
Zn–O	2.167 Å	2.177 Å
Fe–Zn	3.703 Å	3.695 Å
Conformación	<i>Boat boat</i>	<i>Sofa</i>
Deformación (°)	36	32

Tabla 20

Se observa que, aunque la conformación no es la misma, los datos son muy similares. Esto no es sorprendente ya que ambas estructuras en el ciclooctano son de similar energía y se pueden intercambiar por pseudorotación. Las distancias metal-metal son bajas como en muchos de los compuestos homodinucleares que estudiamos a continuación.

Para los 37 fragmentos restantes, las distancias y conformaciones más probables se recogen en la Tabla 21.

Tabla 21.- Distancias y conformaciones para los fragmentos seleccionados

Refcode	Conformación	Distancia Fe-Fe (Å)	Distancia Fe-X (Å)	Distancia X-Fe (Å)
DASDUW	BB	3.337	(X = O) 1.803	(X = O) 1.812
DASDUW10	BB	3.335	(X = O) 1.808	(X = O) 1.806
JUXYEG	S	3.683	(X = O) 2.087	(X = O) 2.110
PUPYAA	TCC	3.645	(X = F) 2.049	(X = F) 2.015
PUPYAA	TCC	3.557	(X = F) 2.007	(X = F) 2.047
MAYFUN	BB	4.930	---	---
MAYFUN	TC	4.748	---	---
MAYFUN	TC	5.024	---	---
FILQIA	TC	3.164	---	---
FILQIA	TCC	3.873	---	---
FILQIA	TCC	3.850	---	---
SINVAM	CC	3.625	(X = O) 2.155	(X = O) 2.155
SINVAM	CC	3.466	(X = O) 2.155	(X = O) 2.155
RAQVAG	TC	4.607	---	---
KEDGIJ	BB	3.197	(X = O) 1.818	(X = O) 1.817
LISVUE	BB	3.418	(X = O) 1.980	(X = O) 2.011
MEWWUG	B	3.092	(X = O) 2.116	(X = O) 2.030
PIMTAG	BC	3.586	(X = O) 1.959	(X = O) 1.978
PITMIO	BC	3.550	(X = O) 2.044	(X = O) 1.976
PITMOU	BB	3.837	(X = O) 2.158	(X = O) 2.107
QOSSUM	BB	3.640	(X = O) 1.954	(X = O) 2.217
TILPEJ	TC	4.820	---	---
WOGHOP	BC	4.987	---	---
XACPEW	BC	3.796	---	---
XACPOG	BB	3.616	(X = O) 1.991	(X = O) 1.971
XIQHIO	TCC	5.216	---	---
XIQHIO	C	5.283	---	---
PEVQIQ	TBC	4.668	---	---
PEVQIQ	TCC	4.817	---	---
PEVQIQ	BB	3.596	---	---
PIMTIO	B	4.677	---	---
PIMTIO	BC	4.677	---	---
PIMTIO	BC	4.677	---	---
QAXQUB	CC	3.654	(X = F) 1.992	(X = F) 1.982
QAXQUB	BC	3.660	(X = F) 1.997	(X = F) 2.005
CAHSOU	TCC	3.667	(X = F) 1.956	(X = F) 2.044
CAHSOU	BC	3.805	(X = F) 2.013	(X = F) 2.134

La distancia más baja es 3.092 Å, perteneciente al fragmento de *refcode* MEWWUG, de configuración *boat* (hay otra, PIMTIO, de 4.677 Å) y la más alta es 5.283 Å correspondiente al fragmento XIQHIO, asignada a la única *chair* que aparece. Además hay:

- **Boat boat** (9). Todas las distancias son bajas excepto en el compuesto de *refcode* MAYFUN, 4.930 Å. El valor medio es 3.656 Å.
- **Boat chair** (8). Tiene 5 valores bajos (PIMTAG, PITMIO, CAHSOU, XACPEW y QAXQUB) y 3 altos (WOGHOP y PIMTIO (2)). El valor medio es 4.092 Å.

- **Twist chair chair** (7). Distancias bajas excepto PEVQIQ y XIQHIO con distancias de 4.817 Å y 5.216 Å, respectivamente. El valor medio es 4.089 Å.
- **Twist chair** (5). Todas altas excepto en FILQIA, 3.164 Å. El valor medio es 4.473 Å.
- **Chair chair** (3). Distancias bajas, valor medio de 3.582 Å.
- **Twist boat chair** (1). Distancia alta: 4.668 Å.
- **Sofa** (1). Distancia baja: 3.683 Å.

El valor medio para la distancia Fe–Fe en los 37 fragmentos es 4.021 Å.

Todas las estructuras que tienen puente de oxígeno o de flúor entre los átomos de hierro presentan distancias metal-metal bajas (entre 3.092 y 3.837 Å). Hay algunos fragmentos con distancias bajas que no tienen puente: FILQIA (3), PEVQIQ y XACPEW.

Las distancias Fe–O presentan valores bajos (1.803 Å), medianos (1.959 Å) y altos (2.158 Å), valores muy variados, mientras que en las Fe–F no hay valores bajos.

Las 5 conformaciones **twist chair**, junto con las únicas de **chair** y de **twist boat chair** no tienen puentes.

La distancia (Fe–X) + (X–Fe), para X = O, F, es mayor, lógicamente que la distancia Fe...Fe. El porcentaje de incremento es, sorprendentemente, bajo o muy bajo en casi todas las estructuras:

- 7 **boat boat** con variación 8 → 17% y valor medio del 12%
- 4 **boat chair**, 9 → 13% y valor medio del 11%
- 3 **twist chair chair**, 9 → 14% y valor medio del 12%
- 3 **chair chair**, 9 → 25% y valor medio del 18%
- 1 **sofa**, 14%
- 1 **boat**, 35%.

Para los 6 casos en que X = F el valor siempre es bajo: 9, 12 y 14% para las 3 **twist chair chair**, 9% para las 2 **boat chair** y también 9% para la **chair chair**.

El bajo número de elementos de la muestra impide extraer conclusiones pero se atisba que los mayores porcentajes se dan cuando X = O.

III.4.2.- Distancias P–O

Para realizar el estudio de las distancias PO utilizaremos los datos de Allen⁵⁵, que para compuestos con funciones similares a la muestra, asigna a la distancia P=O un valor medio de 1.500 Å y a la distancia P–O un valor medio de 1.585 Å.

a) Dentro del anillo

Hay 14 compuestos con distancias P–O por debajo de 1.500 Å. El valor medio es 1.488 Å. El resto, 25, están comprendidas entre 1.500 y 1.585 Å. Ninguna supera el límite de 1.585 Å. El valor medio es 1.526 Å.

El valor medio de estas distancias P–O es 1.512 Å.

b) Fuera del anillo

No hay un solo compuesto con las cuatro distancias P–O inferiores a 1.500 Å. Los compuestos de *refcode* RAQVAG y SINVAM-1 tienen dos distancias menores que ese valor, todas de 1.476 Å, y otras dos de 1.560 Å para el primero y 1.641 Å para el segundo. El compuesto KEDGIJ tiene 1.475, 1.481, 1.627 y 1.629 Å. Finalmente, hay un compuesto, LISVUE, con una sola distancia menor: 1.488, 1.502, 1.559 y 1.582 Å. En todos ellos el valor medio supera los 1.5 Å citados. En el intervalo de 1.500 y 1.585 Å encontramos todas las demás, pero cerca del límite de 1.585 Å hay siete casos, siendo el más llamativo el fragmento SINVAM-2 con dos valores de 1.527 Å y otros dos de 1.641 Å y valor medio 1.584 Å. Las restantes tienen las cuatro distancias parecidas.

El valor medio de todas estas distancias P–O es 1.556 Å, bastante superior al caso anterior, 1.512 Å.

A la vista de estos datos podemos indicar que, en general, el carácter de doble enlace en la unión P–O es mayor dentro del anillo que fuera del mismo. Sólo hay inversión de los valores en los tres fragmentos de *refcode* PUPYAA, FILQIA-1 y RAQVAG, y con valores próximos en PEVQIQ-1 y PEVQIQ-3.

III.4.3.- Distancias Fe–O del anillo

La media de las cuatro distancias Fe–O es similar en todos los fragmentos, lo que indica que la influencia del entorno del hierro y su grado de oxidación no inciden especialmente. El intervalo varía desde 1.919 Å (MAYFUN-2) hasta 2.083 Å (JUX-YEG), siendo el valor medio para todas 1.988 Å. Hay 16 fragmentos con valores menores que la media, 8 que están en el intervalo 1.980→1.996 Å y 15 que la superan.

Algunos fragmentos tienen sus cuatro distancias muy parecidas, siendo llamativo el de SINVAM-1, que tiene las cuatro exactamente iguales: 1.964 Å. Algunas distancias individuales se alejan de la media, siendo la más baja una del fragmento PEV-QIQ-2, 1.874 Å, y la más alta, 2.137 Å (JUXYEG), cuyos 4 fragmentos son de valor muy elevado y originan que sea el de mayor valor medio, como ya se ha comentado.

III.4.4.- Distancias del puente Fe–X–Fe (X = O, F)

a) Para X = O

En general, las distancias Fe–O y O–Fe son parecidas e incluso iguales, en los 13 fragmentos que presentan este puente. Es excepción el caso de los dos compuestos heterodinucleares, QOSSOG y TACZUS, en los que la distancia Fe–O es menor, en ambos, que la O–Zn (2.048 frente a 2.167 Å y 2.031 frente a 2.177 Å). La mayor diferencia entre estas dos distancias se da en el compuesto QOSSUM con valores 1.954 y 2.217 Å.

Algunas distancias Fe–O son bastantes menores que la distancia Fe–O en el anillo. Hay tres fragmentos con distancias ligeramente superiores a 1.8 Å, valor bastante más bajo que el menor valor Fe–O para el anillo: 1.874 Å. También las hay altas: los dos fragmentos de SINVAM tienen distancias iguales a 2.155 Å, valor mayor que el más alto de las Fe–O para el anillo: 2.137 Å. El valor medio para todas ellas es 2.007 Å mayor que las Fe–O del anillo, 1.988 Å.

Como resumen, en los dos compuestos heterodinucleares, la distancia Zn–O es mayor que la Fe–O, y en los compuestos homodinucleares el intervalo de valores de las distancias Fe–O (puente) es mayor que el de las Fe–O dentro del anillo: 1.803 → 2.158 Å frente a 1.874 → 2.137 Å.

b) Para X = F

Para los 6 fragmentos que presentan el puente Fe–F–Fe, las distancias varían en el intervalo 1.956 → 2.134 Å (valor medio 2.020 Å), menor que el de las distancias Fe–O (puente) y Fe–O (anillo), ya citadas. El extremo superior del intervalo para las Fe–F se aproxima al de las Fe–O (anillo), 2.134 Å frente a 2.137 Å. El valor medio de la distancia Fe–F para todos los fragmentos es igual o superior a 2.0 Å, excepto para QAXQUB-1, 1.987 Å.

Los valores de las distancias Fe–F son mayores que las Fe–O (anillo) y (puente), siendo su valor medio 2.020 Å frente a 1.988 y 2.007 Å, respectivamente.

Las distancias Fe–F son menores que las distancias Fe–O y O–Zn en los dos compuestos heterodinucleares, siendo el valor medio 2.020 Å frente a 2.039 Å y 2.172 Å, respectivamente.

No podemos extraer conclusiones dado el bajo número de elementos de la muestra aunque en los compuestos homodinucleares se observa la tendencia de que la distancia media Fe–F es mayor que la Fe–O, ya sea en el anillo o en el puente. En los compuestos heterodinucleares (sólo dos) la tendencia se invierte.