

#### IV.- CONCLUSIONES

1.- Se ha realizado en la CSD la búsqueda sin restricciones de compuestos dinucleares con doble puente O–P–O habiéndose encontrado que existen complejos con las funciones fosfato, fosfonato y fosfinato.

2.- Se han seleccionado, con la ayuda de los programas *ConQuest* y *Mercury*, las estructuras de compuestos dinucleares con doble puente O–P–O de fosfato, habiéndose encontrado 409 compuestos de 32 metales diferentes. Sólo existen 22 complejos heterodinucleares, de los cuales 4 se comportan además como homodinucleares.

3.- Las estructuras se han clasificado tomando como criterio su similitud con las 10 conformaciones teóricas del ciclooctano. Para ello se han desarrollado dos programas, el del profesor Kessler y el del Área de Química Inorgánica que, utilizando los datos de ángulos de torsión, permiten establecer la probabilidad de que una estructura pertenezca a una determinada conformación del ciclooctano. Además, el programa del Área de Química Inorgánica proporciona la deformación de cada estructura respecto a la estructura teórica más probable.

4.- Es de reseñar la potencia del programa desarrollado por el profesor Kessler que permite discernir conformaciones como es el caso del compuesto de *refcode* ZZZMGI01, asignando valores de probabilidad de 0.63238466 para *twist boat chair*, 0.27396032 para *chair*, 0.08759052 para *twist chair*, 0.00359493 para *boat*, 0.00203208 para *boat chair*, 0.00039634 para *boat boat* y 0.00004114 para *sofa*.

5.- La coincidencia de resultados obtenidos mediante la aplicación de los dos programas ha sido del 83.2%, valor ligeramente superior que el de los estudios similares al nuestro realizados para la función fosfonato y fosfinato que fue 81.2% para ambos.

6.- Comparando también nuestro estudio con los citados anteriormente se observa que la relación de metales presentes/ausentes es diferente, así como el porcentaje de abundancia. Sin embargo el número total es muy parecido en los tres casos: 32, 33 y 32, para fosfatos, fosfonatos y fosfinatos respectivamente.

7.- Se han encontrado complejos de las 10 conformaciones teóricas del ciclooctano. La más abundante es la *boat chair* con 22.73%. La que menos, la *crow*n, con 1.21%. Estos valores contrastan con los de los estudios citados, como se observa en la tabla-resumen.

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC
Fosfatos (%)	1.21	7.70	6.21	10.67	14.56	12.15	11.32	7.24	22.73	6.21
Fosfonatos (%)	8.94	16.46	5.89	7.52	13.41	8.54	9.15	9.76	13.21	7.11
Fosfinatos (%)	0.72	2.90	6.52	18.12	18.12	26.09	13.04	0.72	8.70	5.07

8.- Los 9 compuestos de cobre son de un solo fragmento lo que convierte a este metal en uno de los más utilizables a la hora de realizar cualquier trabajo de investigación debido a la ausencia de complicaciones derivadas del alto número de fragmentos por compuesto. En este aspecto hay similitud con los fosfonatos y fosfinatos.

9.- La distribución de conformaciones para los tres estudios es muy diferente entre sí, como cabría esperar por tratarse de funciones químicas distintas. También son muy diferentes a las energías de las 10 configuraciones teóricas del ciclooctano lo que sugiere profundizar en el cálculo de energías para estos compuestos.

10.- La deformación media de todas las estructuras de complejos de metales de transición que presentan un doble puente O–P–O de fosfato es de 31° aproximadamente. Los complejos de cobre son los que presentan una menor deformación media, 19°. Cinc, vanadio y hierro tienen deformaciones de 25 a 32°, siendo el níquel el de mayor deformación, 38°.

11.- Para la misma selección de estructuras, la conformación más frecuente es la *chair* que tiene una deformación media de 19°. Le sigue la *twist chair* con 20°. Además, estas conformaciones son las más abundantes. Estos resultados coinciden totalmente con los obtenidos en el estudio realizado con los fosfinatos.

12.- Del estudio de las 8 distancias P–O (4 en el anillo y 4 fuera del anillo) para los compuestos de hierro con doble puente O–P–O de fosfato, se deduce que, en general, el carácter de doble enlace es mayor dentro del anillo que fuera del mismo.

13.- En los compuestos homodinucleares de hierro que presentan un puente Fe–O–Fe, el intervalo de distancias de Fe–O (puente) es mayor que en el Fe–O (anillo) y en los dos compuestos heterodinucleares la distancia Zn–O es mayor que la Fe–O.

El estudio realizado nos permite sugerir que el cobre es el mejor metal para realizar un trabajo científico de mayor envergadura y profundidad. Asimismo, la poca presencia de complejos de níquel creemos que justifica una de las líneas de investigación del Área de Química Inorgánica.