

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 fosfinato, fosfonato y fosfato.

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 fosfinato, habiéndose encontrado 87 compuestos de 33 metales diferentes. No existen en este estudio complejos heterodinucleares.

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, que, utilizando los datos de ángulos de torsión, permiten establecer la probabilidad de que una estructura pertenezca a una determinada conformación del ciclooctano. Además, uno de los programas 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* HEQCAH-1, asignando valores de probabilidad de 0.87621440 para *boat*, 0.11214969 para *boat boat*, 0.01148844 para la *sofa*, 0.00007761 para la *crown*, 0.00006970 para la *twist chair chair* y de 0.00000016 para la *chair chair*.

5.- La coincidencia de resultados obtenidos mediante la aplicación de los dos programas ha sido del 81.2%, exactamente el mismo valor que el del estudio similar al nuestro realizado para la función fosfonato.

6.- Respecto a los metales, hay compuestos de rutenio, rodio, paladio y plata, ausentes en los fosfonatos, así como un mayor número de lantánidos (7 frente a 3). En los fosfonatos estaban presentes casi todos los metales de los grupos 1 y 2 de los que sólo aparece el sodio en los fosfinatos. En ambos casos el único actínido es el uranio.

7.- Se han encontrado complejos de las 10 conformaciones teóricas del ciclooctano. La más abundante es la *twist chair* con un 26.09%. Las que menos, la *crown*, 0.72%. Estos resultados contrastan con los de los fosfonatos, como se observa en la tabla resumen:

	CR	BB	S	B	C	TC	TCC	CC	BC	TBC
Fosfinatos (%)	0.72	2.90	6.52	18.12	18.12	26.09	13.04	0.72	8.70	5.07
Fosfonatos (%)	8.94	16.46	5.89	7.52	13.41	8.54	9.15	9.76	13.21	7.11

8.- El antimonio y el cobre (10 compuestos cada uno) presentan un número de fragmentos muy parecido al de compuestos (10 y 12, respectivamente). Esta peculiaridad los hace candidatos a la hora de elegir un metal concreto para realizar una publicación ya que se evitan las complicaciones que surgen cuando hay un elevado número de fragmentos por compuesto.

9.- La deformación media de todas las estructuras de complejos con doble puente de fosfinato es 29°. Las más abundantes y menos deformadas, 22°, son la *chair* y la *twist chair*. Estos resultados coinciden globalmente con los que se obtuvieron para los fosfonatos: *twist chair* y *chair*, 20°, deformación media para todas las estructuras, 26°.

10.- El cobre es el metal que presenta menor deformación media, 17°, variando entre 13 y 19° para las cinco configuraciones diferentes que exhibe.

11.- La distancia media cobre-cobre para fosfinatos y fosfonatos es similar, 4.9 Å aproximadamente.

12.- En la relación entre la distancia metal-metal y la configuración se observa la siguiente tendencia:

- La configuración *chair*, mayoritaria, presenta distancias muy diferentes.
- La configuración *twist chair*, tiene distancias altas o muy altas.
- La configuración *twist chair chair* exhibe, en general, distancias bajas

13.- En la relación entre la distancia metal-metal y el grado de deformación se observa, de nuevo, que la configuración *chair* es la menos deformada, siendo el cobre el metal que tiene los fragmentos menos deformados, 16°.

14.- Las distancias medias P–O presentan, mayoritariamente, un carácter de doble enlace (más cercanas a 1500 Å que a 1585 Å).

15.-Las distancias medias M–O varían de mayor a menor valor en el siguiente orden:

estaño > zinc > molibdeno > antimonio > titanio > cobre > aluminio

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.