

ÍNDICE

	Página
I.- INTRODUCCIÓN.....	1
I.1.- Complejos de Níquel(II) con ligandos Fósforo–1,1–Ditiolato.....	1
I.2.- Complejos de Ditioposfato y Ditioposfonato 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	7
I.5.- Ángulos de torsión	21
I.6.- Uso de mapas polares en análisis conformacional	23
I.6.1.- Ángulos de torsión endocíclicos	24
I.6.2.- Mapas polares de ángulos de torsión	24
I.7.- Objetivos y estructuración del trabajo.....	26
II.- METODOLOGÍA	28
II.1.- Medios a utilizar.....	28
II.1.1.- Base de Datos CSD	28
II.1.1.1.- Programa <i>ConQuest</i>	29
II.1.1.2.- Programa <i>Mercury</i>	32
II.1.2.- Programas específicos	36
II.1.2.1.- Implementación en Excel de un algoritmo estadístico de clasificación de conformaciones de n miembros.....	36
II.1.2.2.- Método para asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas.....	38
II.1.3.- Las 10 conformaciones del ciclooctano generadas por el programa <i>Hyperchem</i>	44
II.2.- Selección de las estructuras.....	48

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN	50
III.1.- Aplicación de los programas específicos a los compuestos	
Seleccionados.....	50
III.2.- Criterios utilizados	53
III.2.1.- Metales.....	53
III.2.2.- Conformación.....	58
III.3.- Deformación de las estructuras.....	61
III.3.1.- Relación entre deformación y conformación.....	61
III.3.2.- Relación entre deformación y metales.....	69
III.4.- Distancias de enlace.....	72
III.4.1.- Distancia metal-metal.....	74
III.4.2.- Distancias metal-metal versus conformaciones	76
III.4.3.- Distancias P-O.....	80
III.4.3.- Distancias M-O.....	82
IV.- CONCLUSIONES	84
V.- BIBLIOGRAFÍA.....	87
APÉNDICES.....	89