

ÍNDICE

| | |
|--|-----------|
| ÍNDICE | 1 |
| | |
| CAPÍTULO PRIMERO | |
| 1 INTRODUCCIÓN | 5 |
| 1.1 METALES | 8 |
| 1.1.1 COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE Ni | 8 |
| 1.1.2 COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DE Co | 9 |
| 1.2 LIGANDOS | 10 |
| 1.2.1 1,2-ditiobenceno (dtb) | 10 |
| 1.2.2 1,10-fenantrolina (fen) | 11 |
| 1.2.3 tiourea (tu) | 11 |
| FIGURAS DEL CAPÍTULO PRIMERO | 13 |
| | |
| CAPÍTULO SEGUNDO | |
| 2 SÍNTESIS, CRISTALIZACIÓN Y DETALLES | |
| EXPERIMENTALES | 14 |
| 2.1 SÍNTESIS | 14 |
| 2.1.1 SÍNTESIS CON EL LIGANDO dtb | 14 |
| 2.1.1.1 Preparación de dtb ²⁻ | 14 |
| 2.1.1.2 Complejos de Ni ²⁺ (compuesto i) | 15 |
| 2.1.1.3 Complejos de Co ²⁺ (compuesto ii) | 16 |
| 2.1.2 SÍNTESIS CON LOS LIGANDOS dtb Y fen (compuesto iii) | 17 |
| 2.1.3 SÍNTESIS CON LOS LIGANDOS dtb Y tu (compuesto iv) | 17 |
| 2.1.4 SÍNTESIS CON LOS LIGANDOS fen Y tu | 18 |
| 2.1.4.1 Complejos de Ni ²⁺ (compuestos 1, 2 y 2') | 18 |
| 2.1.4.2 Complejos de Co ²⁺ (compuesto 3) | 19 |
| 2.2 CRISTALIZACIÓN DE LOS COMPUESTOS SINTETIZADOS | 20 |

| | |
|--|----|
| 2.2.1 CRISTALIZACIÓN DE COMPUESTOS DE Ni(dtb) ₂ ²⁻ | 32 |
| Y Co(dtb) ₂ ²⁻ | 20 |
| 2.2.2 RECRISTALIZACIÓN DE COMPUESTOS i, ii Y iii | 21 |
| 2.2.2.1 Compuesto i | 21 |
| 2.2.2.2 Compuesto ii | 22 |
| 2.2.2.3 Compuesto iii | 22 |
| 2.2.3 CRISTALIZACIÓN DE 1, 2, 2' Y 3 | 23 |
| 2.3 DETALLES EXPERIMENTALES | 23 |
| 2.3.1 ANÁLISIS ELEMENTAL | 23 |
| 2.3.2 ESPECTROSCOPIA IR | 23 |
| 2.3.3 DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE POLVO | 24 |
| 2.3.4 DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL | 24 |
| FIGURAS DEL CAPÍTULO SEGUNDO | 26 |
| CAPÍTULO TERCERO | 51 |
| 3 CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS i, ii Y iii | 27 |
| 3.1 COMPUESTO i | 27 |
| 3.1.1 ANÁLISIS ELEMENTAL | 27 |
| 3.1.2 ESPECTROSCOPIA IR | 27 |
| 3.1.3 DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE POLVO | 28 |
| 3.1.4 CONCLUSIONES SOBRE EL COMPUESTO i | 29 |
| 3.2 COMPUESTO ii | 29 |
| 3.2.1 ANÁLISIS ELEMENTAL | 29 |
| 3.2.2 ESPECTROSCOPIA IR | 29 |
| 3.2.3 DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE POLVO | 30 |
| 3.2.4 CONCLUSIONES SOBRE EL COMPUESTO ii | 30 |
| 3.3 COMPUESTO iii | 30 |
| 3.3.1 ESPECTROSCOPIA IR | 30 |
| 3.3.2 DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE POLVO | 31 |
| 3.3.3 CONCLUSIONES SOBRE EL COMPUESTO iii | 31 |

| | |
|--|-----------|
| TABLAS DEL CAPÍTULO TERCERO | 32 |
| FIGURAS DEL CAPÍTULO TERCERO | 33 |
| CAPÍTULO CUARTO | |
| 4 ESTRUCTURA DEL COMPUESTO 1 | 37 |
| 4.1 DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL | 37 |
| 4.1.1 COLECCIÓN Y PROCESAMIENTO DE DATOS | 37 |
| 4.1.2 RESOLUCIÓN Y REFINAMIENTO DE LA ESTRUCTURA | 37 |
| 4.2 CONCLUSIONES SOBRE LA ESTRUCTURA 1 | 38 |
| TABLAS DEL CAPÍTULO CUARTO | 42 |
| FIGURAS EL CAPÍTULO CUARTO | 48 |
| CAPÍTULO QUINTO | |
| 5 ESTRUCTURAS DE LOS COMPUESTOS 2 Y 2' | 51 |
| 5.1 DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE 2 Y 2' | 51 |
| 5.1.1 COMPUESTO 2 | 51 |
| 5.1.1.1 Colección y procesamiento de datos. | 51 |
| 5.1.1.2 Determinación del grupo espacial | 52 |
| 5.1.1.3 Resolución y refinamiento de la estructura | 53 |
| 5.1.2 COMPUESTO 2' | 54 |
| 5.1.2.1 Colección y procesamiento de datos | 54 |
| 5.1.2.2 Resolución y refinamiento de la estructura | 55 |
| 5.2 CONCLUSIONES SOBRE LAS ESTRUCTURAS 2 Y 2' | 56 |
| 5.2.1 DETERMINACIÓN DEL GRUPO ESPACIAL DE LA ESTRUCTURA 2' | 56 |
| 5.2.2 DISCUSIÓN Y COMPARACIÓN ENTRE LAS ESTRUCTURAS | 58 |
| TABLAS DE CAPÍTULO QUINTO | 62 |
| FIGURAS DE CAPÍTULO QUINTO | 75 |

CAPÍTULO SEXTO

| | |
|--|-----------|
| 6 ESTRUCTURA DEL COMPUESTO 3 | 79 |
| 6.1 RESOLUCIÓN Y REFINAMIENTO | 79 |
| 6.1.1 COLECCIÓN Y PROCESAMIENTO DE DATOS | 79 |
| 6.1.2 RESOLUCIÓN Y REFINAMIENTO DE LA ESTRUCTURA | 79 |
| 6.2 CONCLUSIONES SOBRE LA ESTRUCTURA 3 | 80 |
| TABLAS DEL CAPÍTULO SEXTO | 83 |
| FIGURAS DEL CAPÍTULO SEXTO | 88 |

CAPÍTULO SÉPTIMO

| | |
|--|-----------|
| 7 DISCUSIÓN COMPARATIVA DE LAS ESTRUCTURAS 1, 2, 2' Y 3 | 91 |
| 7.1 COORDINACIÓN | 91 |
| 7.2 LIGANDO fen | 93 |
| 7.3 LIGANDO tu | 94 |
| TABLAS DE CAPÍTULO SÉPTIMO | 96 |
| BIBLIOGRAFÍA | 99 |