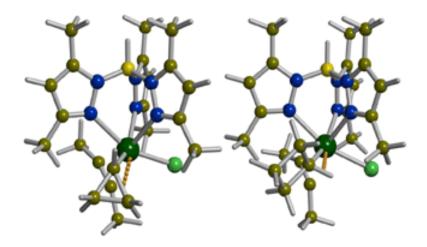


03/2007

## Buscando pruebas de nuevas interacciones entre átomos



La naturaleza está constituida por átomos que acostumbran a formar moléculas más o menos complejas. Los enlaces e interacciones mantienen a los átomos unidos. Este estudio se ha centrado en uno enlaces muy poco conocidos, los enlaces o interacciones agósticas. Son muy particulares, ya que en lugar de unir dos átomos, unen un átomo y un enlace.

La naturaleza está constituida por átomos que acostumbran a formar moléculas más o menos complejas. Los enlaces e interacciones mantienen a los átomos unidos. Des de hace unos años se conocen nuevas clases de enlace y de interacciones, que han permitido entender la estabilidad y la estructura de diferentes especies, así como su papel en diferentes reacciones químicas. Dentro de las diferentes clases de enlace, encontramos algunas muy conocidas, como los covalentes o el enlace (puente) de hidrógeno. El objeto de nuestro estudio ha sido, no obstante, otro enlace que también se encuentra en este grupo, pero que es menos conocido, el enlace o interacción agóstica.

Los enlaces o interacciones agósticas son muy particulares, ya que, en lugar de unir dos átomos, unen un átomo y un enlace. Son intramoleculares y, para que sean efectivos, hace falta que el átomo sea un metal y el enlace sea  $\sigma$ . Los enlaces  $\sigma$  son muy comunes; son un ejemplo los C-H, O-H, B-H y también los C-C, C-O, P-C. A priori, puede parecer extraño que un átomo

interaccione con un enlace en lugar de hacerlo con un átomo, pero se conocen numerosos casos de interacciones de este tipo (el complejo ha de tener determinadas propiedades).

Los agósticos entre un metal y un enlace  $\sigma$  con un átomo de hidrógeno (C-H, N-H, P-H..) son bastante conocidos. En cambio, se conocen muy pocos casos de agósticos formados por enlaces  $\sigma$  sin hidrógenos (C-C, P-C,...). En el estudio al que hace referencia este artículo se estudió los complejos ( $Tp^{Me2}NbCl(c-C_nH_{2n-1})(MeC\equiv CMe)$ , n=3-6), y se vio que uno de ellos presentaba una interacción agóstica entre un enlace  $\sigma$  C-C de uno de sus ligandos y el metal. En las investigaciones en colaboración entre los grupos de investigación de M. Etienne (Toulouse), J.E. McGrady (Glasgow) y F. Maseras (ICIQ i UAB), se ha hecho uso de técnicas experimentales y computacionales.

La investigación mostró unos resultados tan sorprenendentes como interesantes. A la izquierda se presenta el Tp<sup>Me2</sup>NbCl(*c*-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)(MeC≡CMe), que contiene un ciclo de tres átomos, donde uno de los enlaces C-C forma una inusual interacción agóstica C-C.

El complejo que se presenta a la derecha es el Tp<sup>Me2</sup>NbCl(*c*-C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>)(MeC≡CMe), que es estabilizado por una interacción agóstica C-H (usual) y en el que no hay evidencias de ningún agóstico C-C (inusual). El único complejo que presenta una interacción agóstica es el del ciclo de tres miembros. Este hecho se ha atribuido a que un ciclo de tres miembros tiene el ángulo C-C-C del anillo significativamente más pequeño que en ciclos más grandes.

## Maria Besora Bonet

Universitat Autònoma de Barcelona maria@klingon.uab.es

## Referencias

"Structure and bonding in a cyclobutyl tris(pyrazolyl)boratoniobium complex and the variation in agostic behaviour with ring size in the series Tp(Me2)NbCl(c-CnH2n-1)(MeC CMe), n=3-6". Besora, M; Maseras, F; McGrady, JE; Oulie, P; Dinh, DH; Duhayon, C; Etienne, M. DALTON TRANSACTIONS, (19): 2362-2367 2006.

View low-bandwidth version