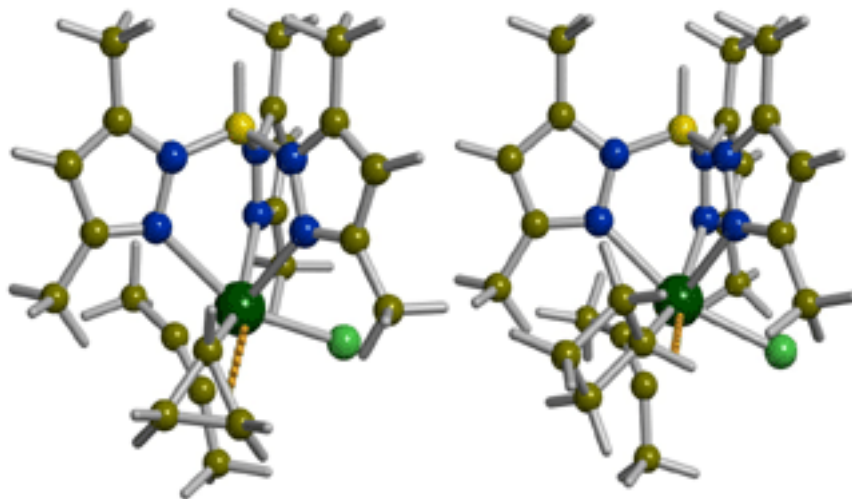


Cercant evidències de noves interaccions entre àtoms

03/2007 - **Química**. La natura està constituïda per àtoms, que acostumen a formar molècules més o menys complexes. Els enllaços i interaccions mantenen els àtoms units. Aquest estudi s'ha centrat en uns enllaços molt poc coneguts, els enllaços o interaccions agòstiques. Són molt particulars, ja que en lloc d'unir dos àtoms, uneixen un àtom i un enllaç.



La natura està constituïda per àtoms, que acostumen a formar molècules més o menys complexes. Els enllaços i interaccions mantenen als àtoms units. Des de fa uns anys es coneixen noves classes d'enllaç i d'interaccions, que han permès entendre l'estabilitat i l'estructura de diferents espècies, així com el seu paper en diferents reaccions químiques. Dins de les diferents classes d'enllaç en trobem de molt coneguts, com els covalents o l'enllaç (pont) d'hidrogen. L'objecte del nostre estudi ha estat, però, un altre enllaç que també es troba en aquest grup, però que és menys conegut, l'enllaç o interacció agòstica.

Els enllaços o interaccions agòstiques són molt particulars, ja que en lloc d'unir dos àtoms uneixen un àtom i un enllaç. Són intramoleculars i per a què siguin efectives cal que l'àtom sigui un metall i l'enllaç sigui #. Els enllaços # són molt comuns i en són un exemple els C-H, O-H, B-H i també els C-C, C-O, P-C. A priori pot semblar estrany que un àtom interaccioni amb un enllaç en lloc de fer-ho amb un àtom, però es coneixen nombrosos casos d'interaccions d'aquesta mena (el complex ha de tenir determinades propietats).

Els agòstics entre un metall i un enllaç # amb un àtom d'hidrogen (C-H, N-H, P-H..) són força coneguts, en canvi es coneixen molt pocs casos d'agòstics formats per enllaços # sense hidrògens (C-C, P-C,...). En l'estudi al qual fa referència aquest article es van estudiar els complexos $(\text{Tp}^{\text{Me}_2}\text{NbCl}(\text{c-C}_n\text{H}_{2n-1}))(\text{MeC}\#\text{CMe})$, $n=3-6$, i es va veure que un d'ells presentava una interacció agòstica entre un enllaç # C-C d'un dels seus lligands i el metall. En les investigacions en col·laboració entre els grups de recerca de M. Etienne (Toulouse), J.E. McGrady (Glasgow) i F. Maseras (ICIQ i UAB), s'ha fet ús de tècniques experimentals i computacionals.

La recerca va mostrar uns resultats tan sorprenents com interessants. A l'esquerra es presenta el $\text{Tp}^{\text{Me}_2}\text{NbCl}(\text{c-C}_3\text{H}_5)(\text{MeC}\#\text{CMe})$, que conté un cycle de tres àtoms, on un dels enllaços C-C forma una inusual interacció agòstica C-C.

El complex que es presenta a la dreta és el $\text{Tp}^{\text{Me}_2}\text{NbCl}(\text{c-C}_4\text{H}_7)(\text{MeC}\#\text{CMe})$, que és estabilitzat per una interacció agòstica C-H (usual) i en el que no hi ha evidències de cap agòstic C-C (inusual). L'únic complex que presenta una interacció agòstica és el del cycle de tres membres. Aquest fet s'ha atribuït a què un cycle de tres membres té l'angle C-C-C de l'anell significativament més petit que en cycles més grans.

Maria Besora Bonet

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

"Structure and bonding in a cyclobutyl tris(pyrazolyl)boratoniobium complex and the variation in agostic behaviour with ring size in the series $\text{Tp}(\text{Me}_2)\text{NbCl}(\text{c-C}_n\text{H}_{2n-1})(\text{MeC}=\text{CMe})$, $n=3-6$ ". Besora, M; Maseras, F; McGrady, JE; Oulie, P; Dinh, DH; Duhayon, C; Etienne, M. DALTON TRANSACTIONS, (19): 2362-2367 2006.