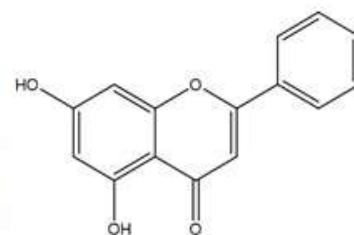
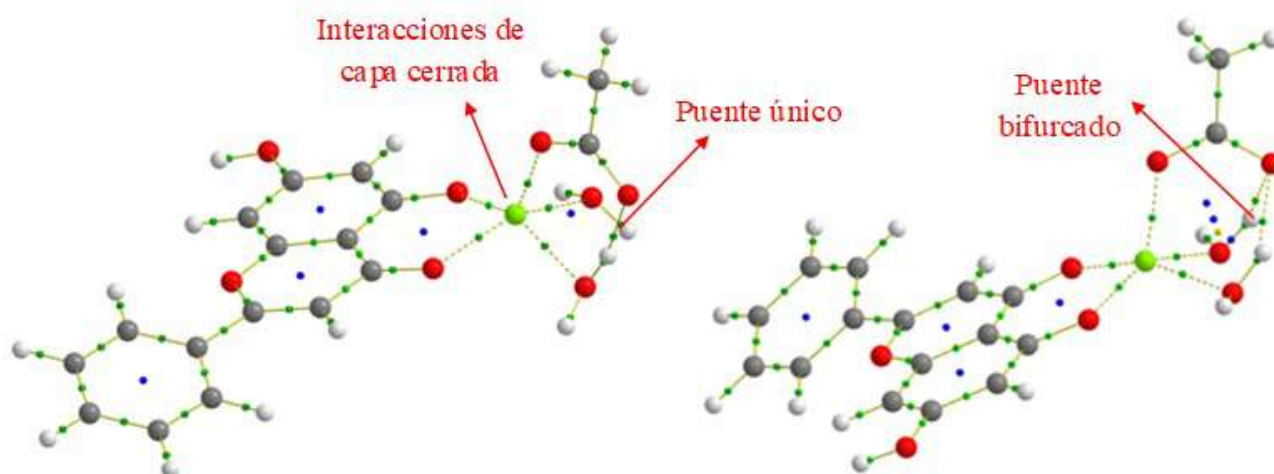


Introducción: previamente hemos realizado una exhaustiva búsqueda conformacional del complejo de magnesio(II) con el flavonoide crisina ($[Mg(crisina)(CH_3COO)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$, Mg/cris) y hemos demostrado la coexistencia de 12 conformeros a temperatura ambiente. Es evidente además la existencia de tres familias de conformeros. La Familia 1 con geometría piramidal cuadrada, la Familia 2 con geometría bipiramidal de base triangular con el acetato en posición ecuatorial y la Familia 3 con igual geometría que la 2 pero con el acetato axial. El objetivo del presente trabajo es analizar los conformeros del complejo Mg/cris en el marco de la teoría de Bader de Átomos en Moléculas (AIM) para caracterizar los enlaces metal-ligando y detectar la presencia de puentes de hidrógeno (HB) intramoleculares.



Resultados y Conclusiones: los parámetros topológicos sugieren que los enlaces entre los oxígenos de los ligandos (flavonoide, acetato y agua) y el magnesio constituyen interacciones de capa cerrada. Además, pudieron evidenciarse un número variable de HB entre el oxígeno del carbonilo libre del acetato (en su forma monodentada) y los hidrógenos de las moléculas de agua. En las estructuras piramidales, el oxígeno del carbonilo libre (del acetato) puede formar puentes con uno o con dos hidrógenos (puente bifurcado) de las moléculas de agua.



El puente único presenta parámetros topológicos congruentes con un HB fuerte mientras que la formación del puente bifurcado genera dos HB más débiles y la formación de una estructura de caja. La existencia de los HB se evidencia por la formación del punto crítico de enlace $O \cdots H$ y el camino que conecta ambos núcleos, además del punto crítico de anillo en el pseudoanillo formado. En el puente bifurcado aparece además un punto crítico de caja en la cavidad formada. Los resultados nos permiten concluir que los HB intramoleculares podrían ser uno de los factores decisivos en la constitución del espacio conformacional del complejo Mg/cris.