

# **Química de la Coordinación**

## **Isomería**

**Isómeros**  
Especies químicas con igual nº y tipo de átomos pero diferentes propiedades

**Estereoisómeros**  
Igual número y tipo de enlaces químicos pero en diferentes disposición espacial



**Isómeros estructurales**  
Poseen diferente número y tipo de enlaces químicos

**Isómeros ópticos**  
Imágenes especulares no superponibles

**Isómeros geométricos**  
Con diferente disposición espacial: *cis-trans* ; *mer-fac*

**Isómeros de coordinación**  
Difieren debido a un intercambio de ligandos entre esferas de coordinación

**Isómeros de ionización**  
Difieren debido a un intercambio de grupos entre esferas de coordinación y contraiones

**Isómeros de enlace**  
diferentes enlaces metal-ligando

## Glosario de términos usados en estereoquímica

✓ **Estereoisómeros:** Dos o más moléculas que tienen la misma fórmula empírica y la misma secuencia de enlaces átomo a átomo, pero en las que los átomos difieren por su ordenación en el espacio.

✓ **Enantiómero:** Un estereoisómero que no puede superponerse con su imagen en un espejo.

✓ **Diastereoisómeros:**

Estereoisómeros que no son enantiómeros; la diastereoisomeria incluye la isomería *cis-trans* como subclase.

✓ **Asimétricas:**

Se aplica a las moléculas que carecen por completo de simetría.

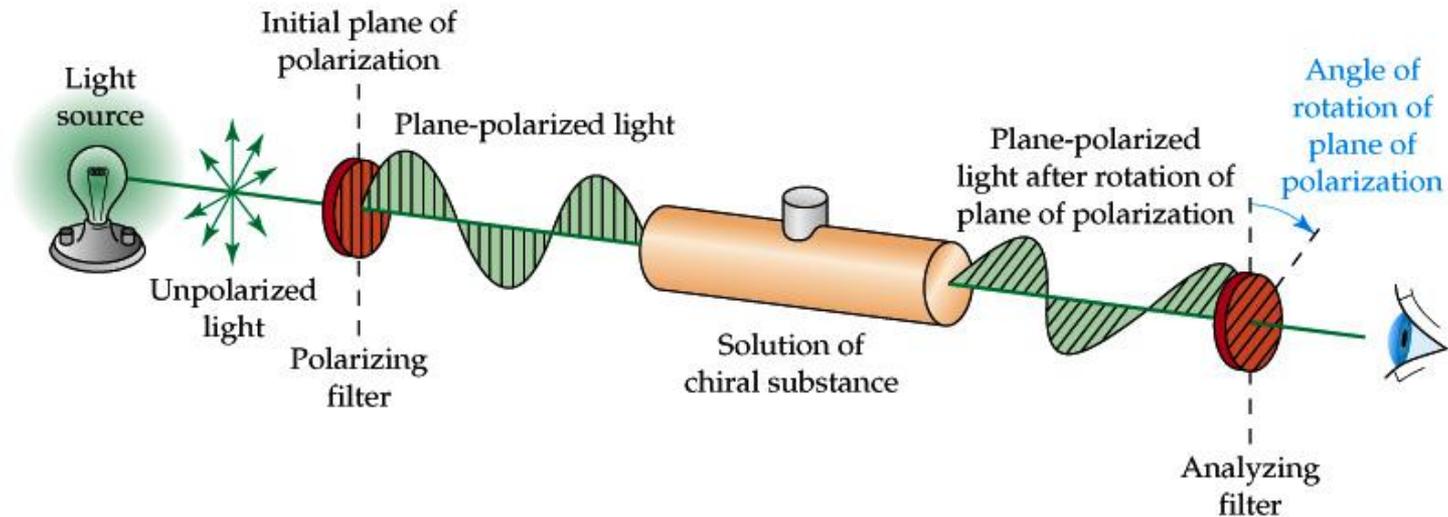
✓ **Disimétricas:** Se aplica a una molécula a la que falta un eje  $S_n$  es decir un eje de rotación reflexión. La molécula disimétrica no tiene ni plano de simetría, ni centro de simetría. Para que una molécula posea un enantiómero no debe tener un eje  $S_n$ . Sin embargo, una molécula disimétrica puede poseer un eje propio de simetría de rotación  $C_n$  (con  $n > 1$ ).

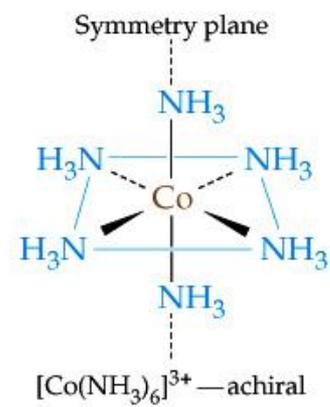
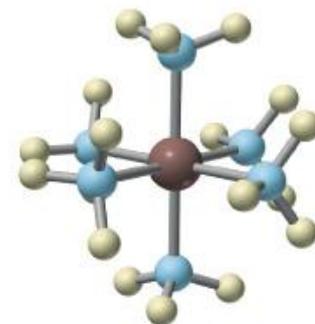
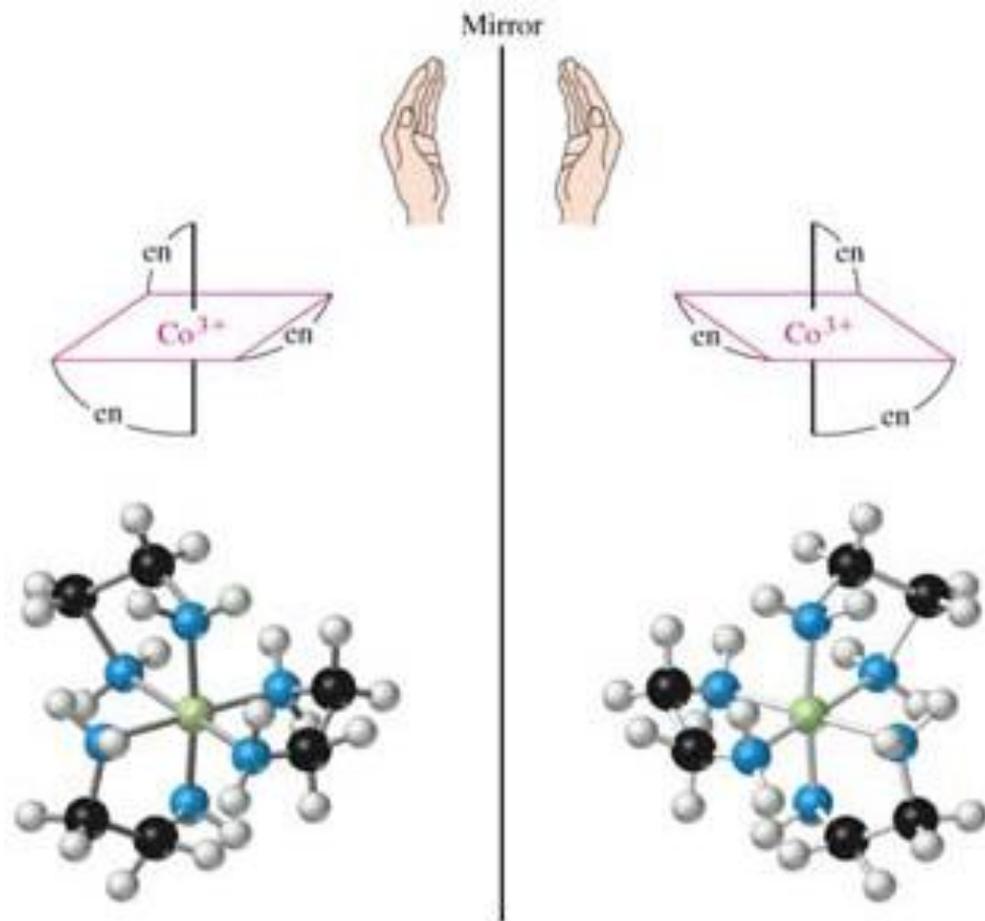
## Glosario de términos usados en estereoquímica

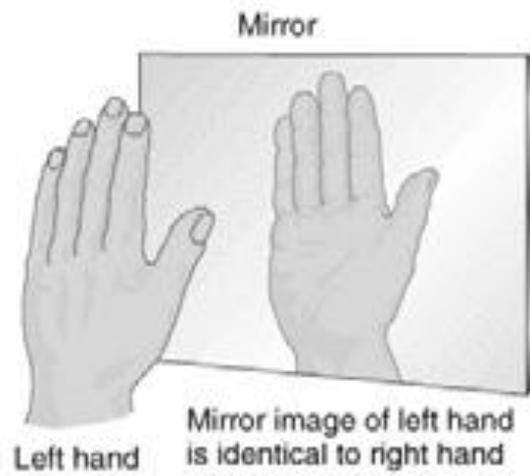
- ✓ **Compuesto quiral:** Una molécula que es asimétrica o disimétrica es *quiral* y por tanto no puede superponerse con su imagen en un espejo. La quiralidad implica la existencia de relaciones tales como la que existe entre la mano derecha y la mano izquierda (guarda relación con las “manos”) y las moléculas de quiralidad opuesta (*enantiómeros*) se encuentran relacionadas entre sí como la mano derecha y la mano izquierda.
- ✓ **Actividad Óptica:** capacidad que poseen las moléculas quirales para producir un giro del plano de la luz polarizada plana.

# Isomería Óptica

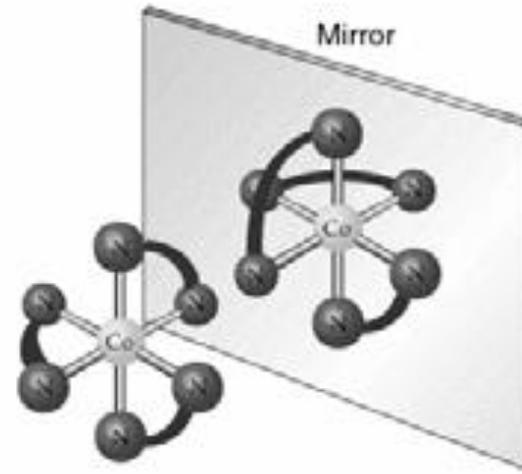
✓ **Actividad Óptica:** capacidad que poseen las moléculas quirales para producir un giro del plano de la luz polarizada plana.





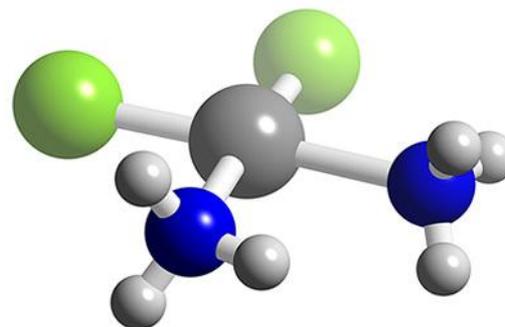
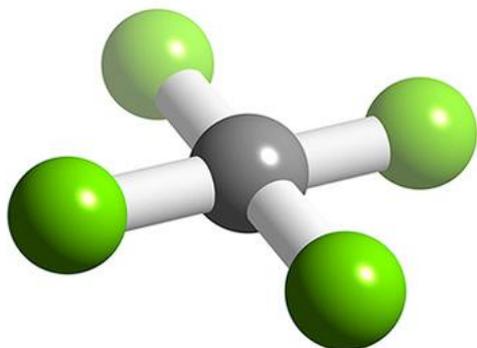


(a)

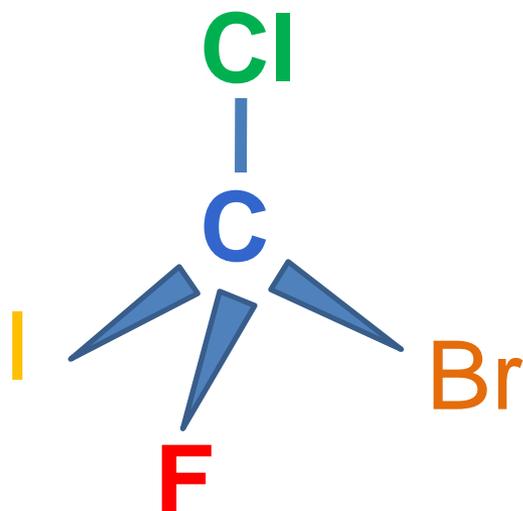


(b)

*Imagen especular no superponible → Asimétricas*



***aqirales***

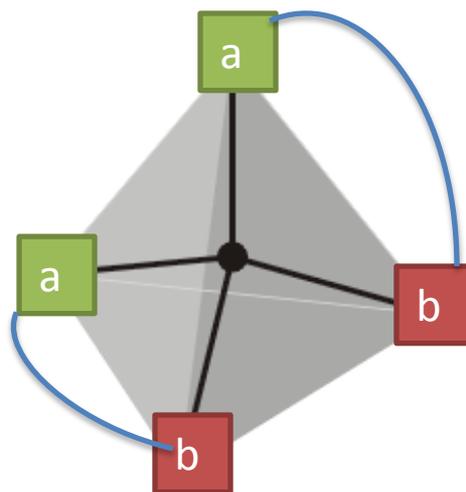
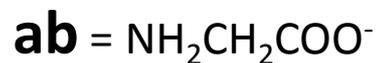


***Quiral***

*(ausencia plano de simetría)*

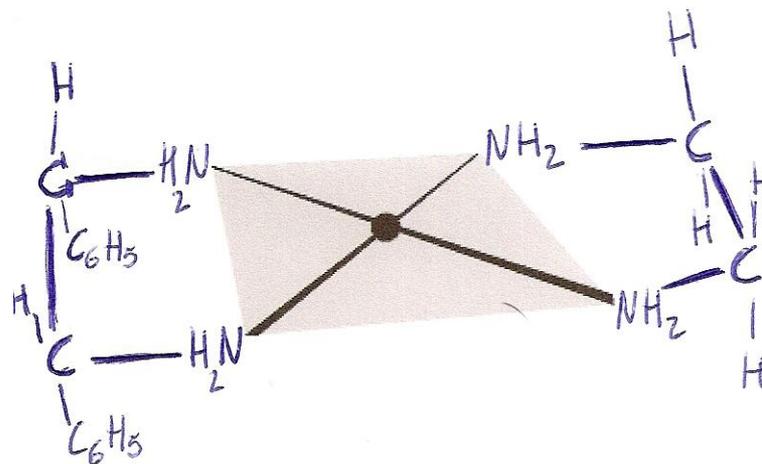
✓ Isómeros ópticos, ***Td***:

- Cuatro ligandos diferentes (difícil preparación).
- Dos ligandos quelato asimétricos.

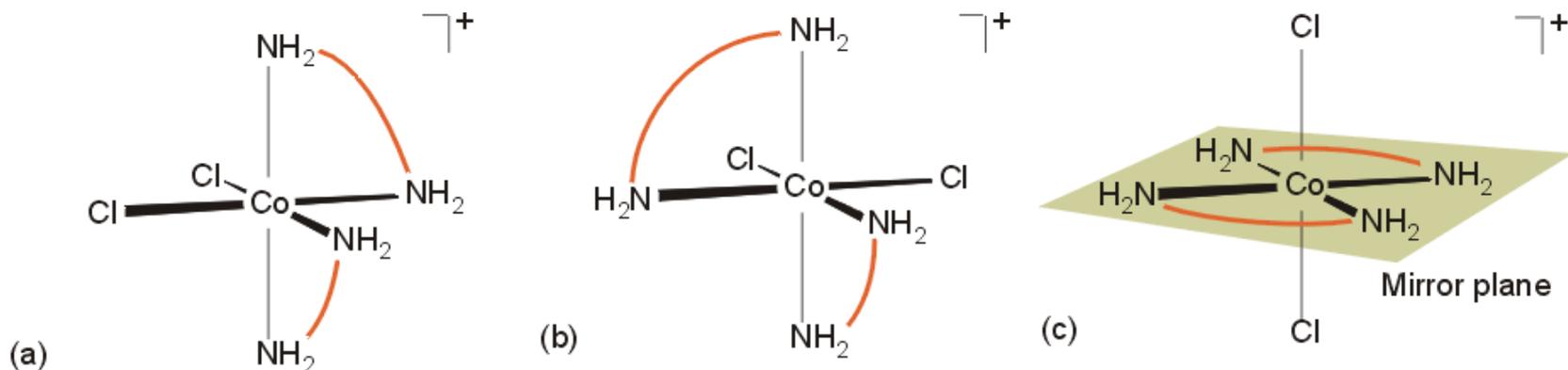


✓ Isómeros ópticos, ***D4h***:

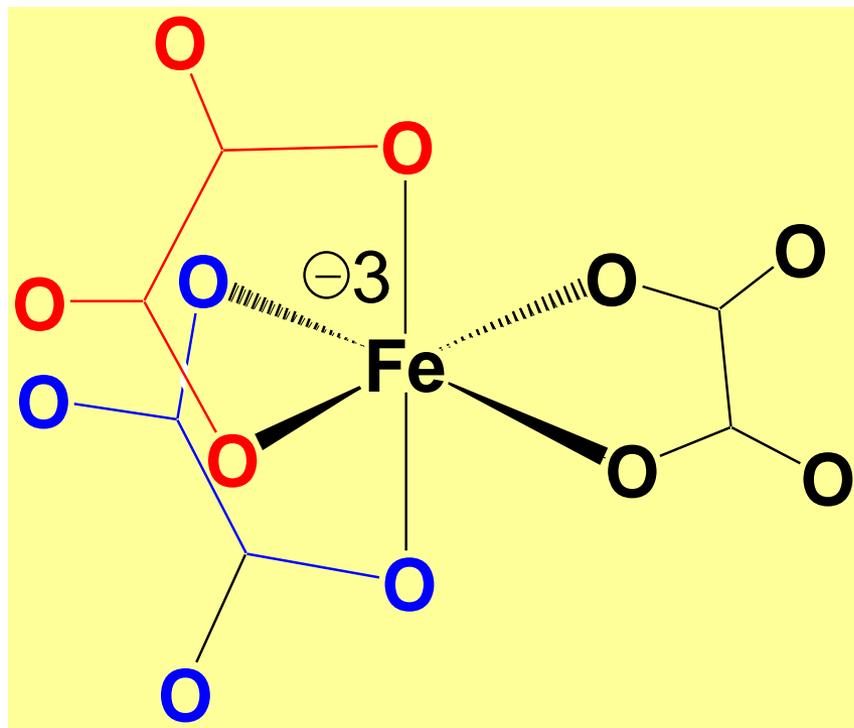
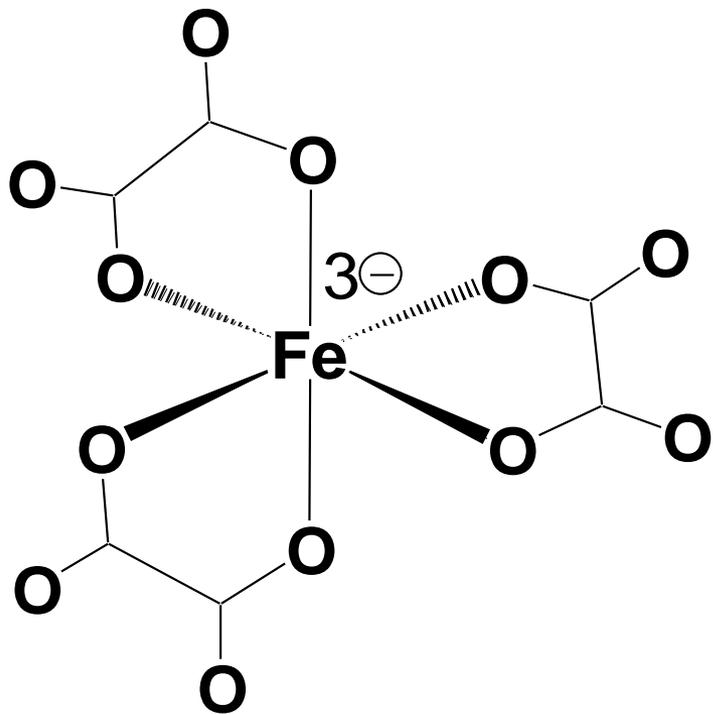
- Dos ligandos quelato asimétricos.

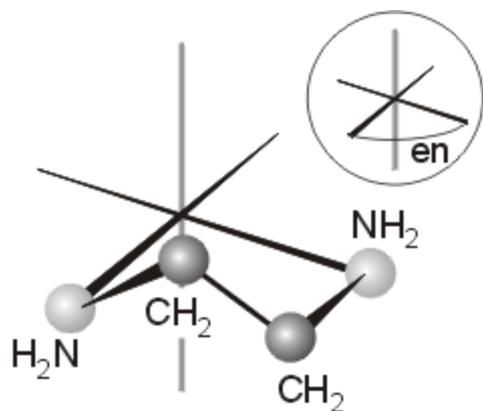


- ✓ Isómeros ópticos, **Oh**:  
- Numerosos ejemplos

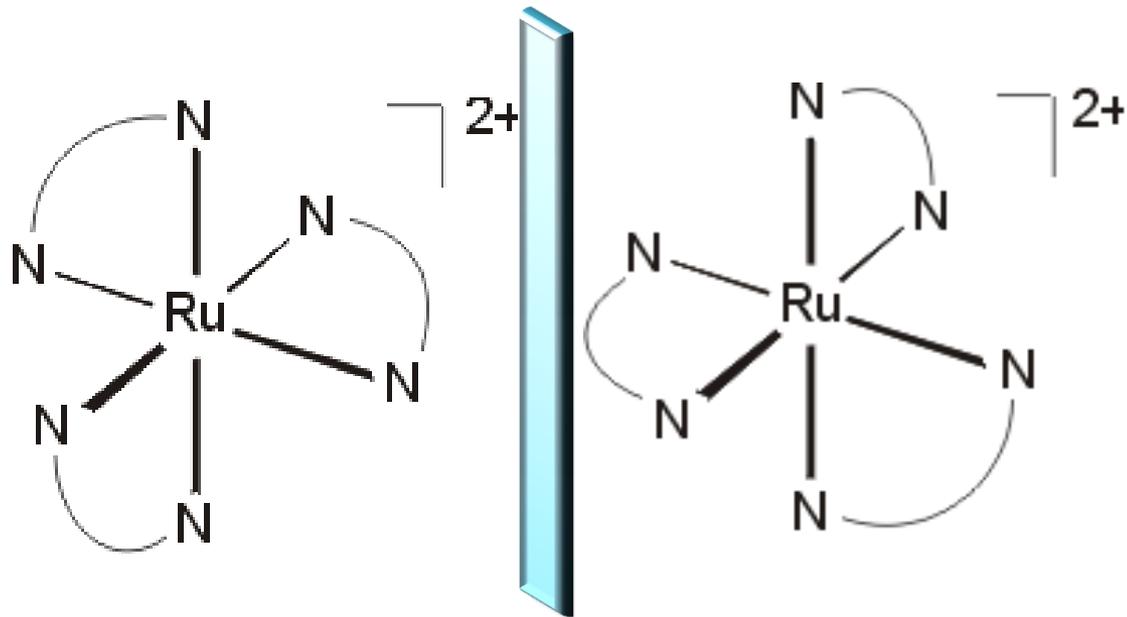


**Compuestos  $Ma_2(c-c)_2$  ; C-C = ligando bidentado**





Ethylenediamine ligand (en)



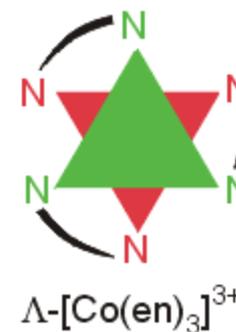
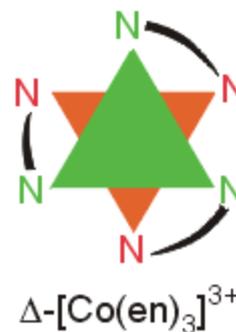
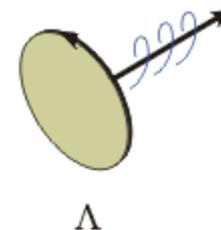
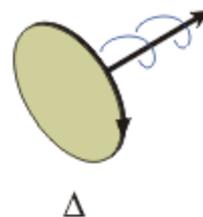
✓ **Enantiómero ó enantiomorfos:**

- Propiedades físicas y químicas idénticas
- Giro plano luz polarizada en una dirección

**d** : *dextrógiro* (giro a la derecha)

**l** : *levógiro* (giro a la izquierda)

Nomenclatura: d/l delante del nombre del compuesto quiral

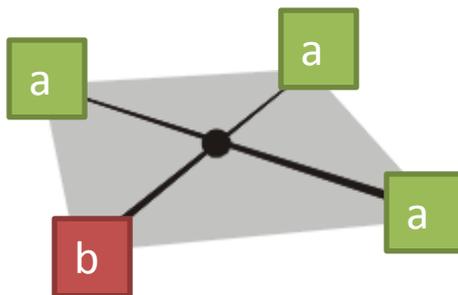


## Isomería Geométrica

Los compuestos difieren en la disposición espacial de los ligandos: *cis-trans* ; *mer-fac*

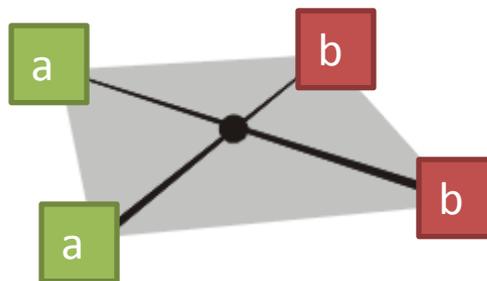
✓ Compuestos planocuadrados,  $D_{4h}$  :

$Ma_3b$

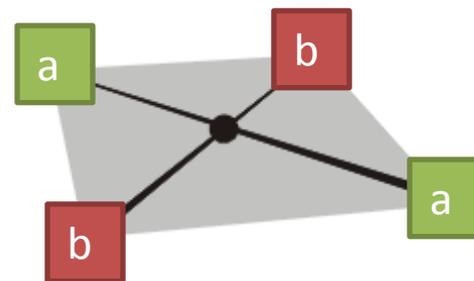


No tiene isómeros

$Ma_2b_2$

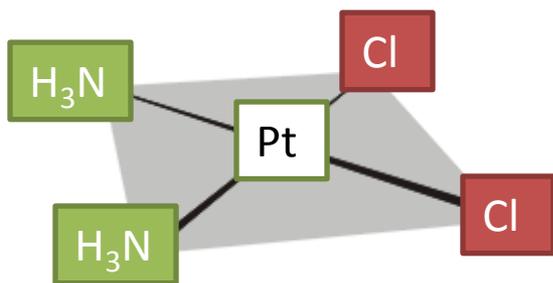


*cis* -

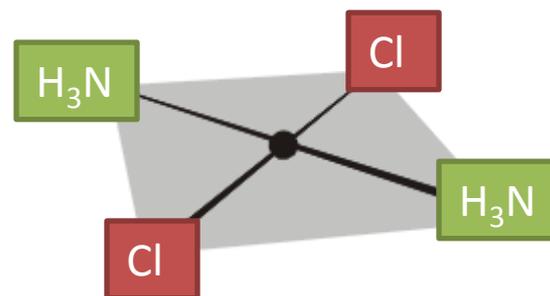


*trans* -

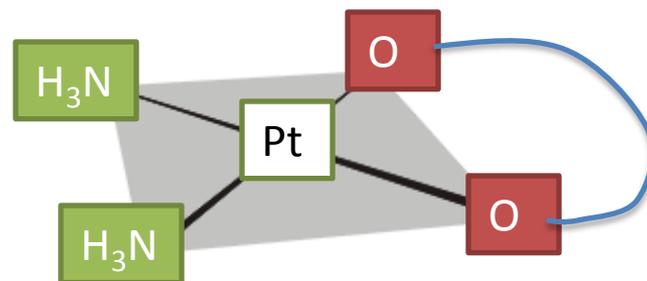
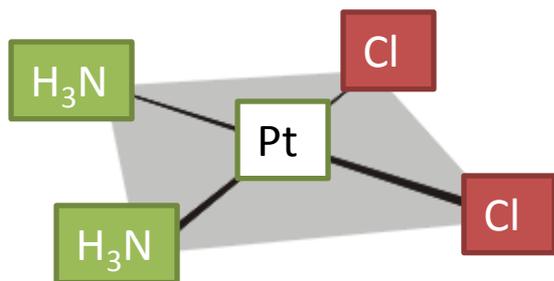
# [Pt(NH)<sub>3</sub>Cl<sub>2</sub>]:



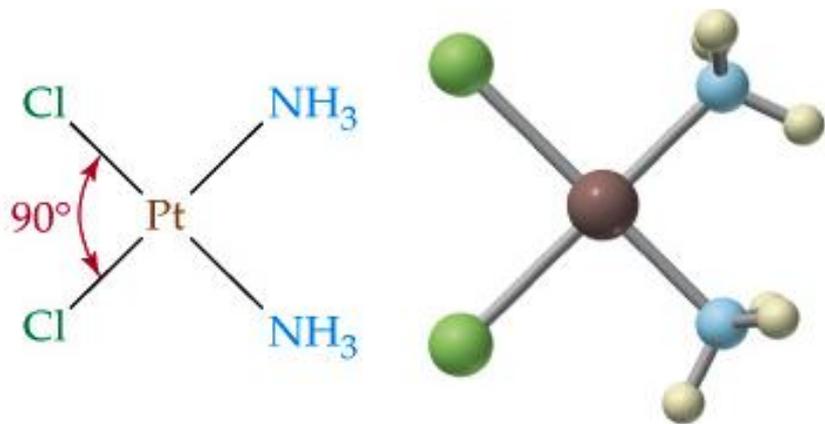
*cis – diaminodichloroplatino (II)*



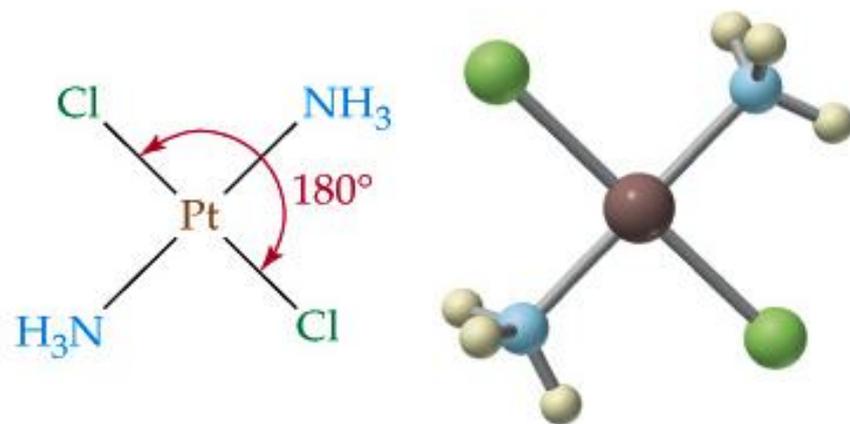
*cis – diaminodichloroplatino (II)*



*cis – diaminooxalatoplatinato (II)*

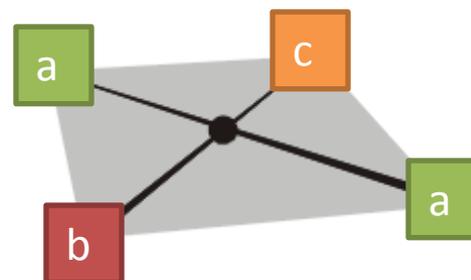
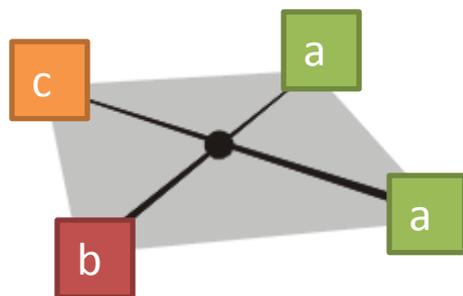


**(a)** cis



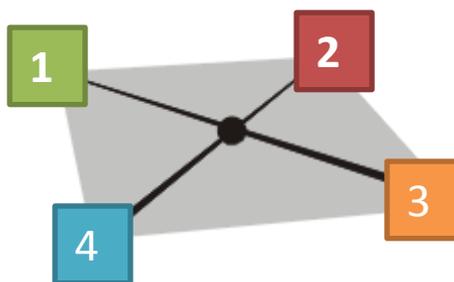
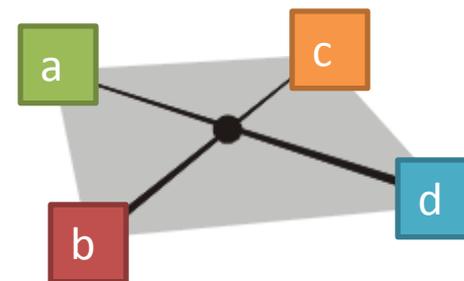
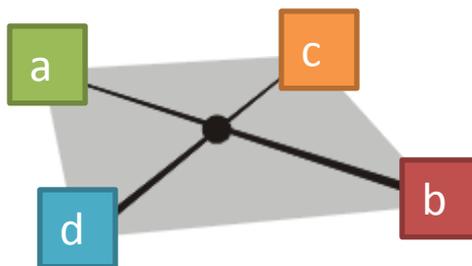
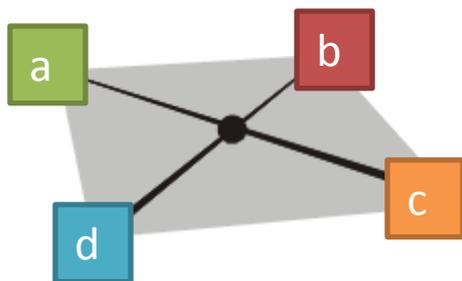
**(b)** trans

# $Ma_2bc$



Ejemplo: *cis- ó trans- cloruro de aminoclorobis(piridina)platino (II)*

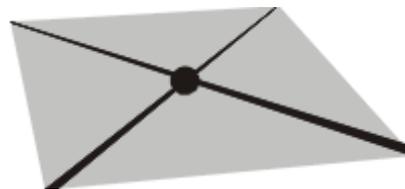
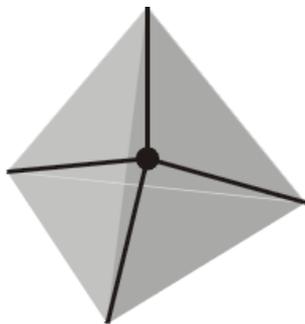
# $Mabcd$



# **[Pt(NH<sub>3</sub>)BrCl(py)]** : aminobromocloro(piridina) platino (II)

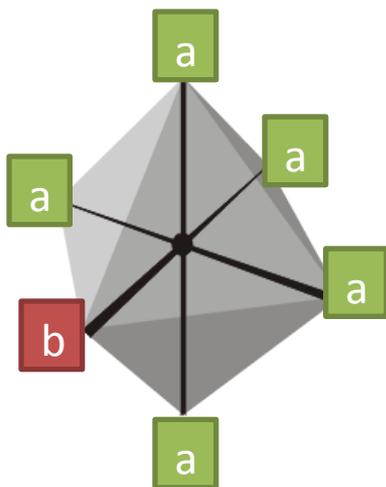
- *trans- aminobromocloro(piridina)platino (II)*  
*1-amino-3-bromocloro(piridina)platino (II)*
- *1-aminobromo-3-cloro(piridina)platino (II)*
- *1-aminobromocloro-3-(piridina)platino (II)*

✓ Compuestos tetraédricos, **Td** → No tienen isómeros geométricos



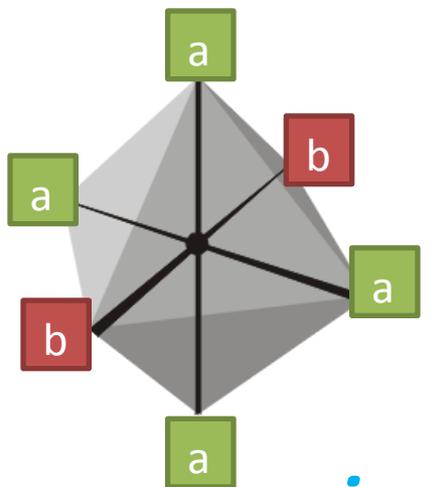
✓ Compuestos octaédricos, ***Oh*** :

***Ma<sub>5</sub>b***

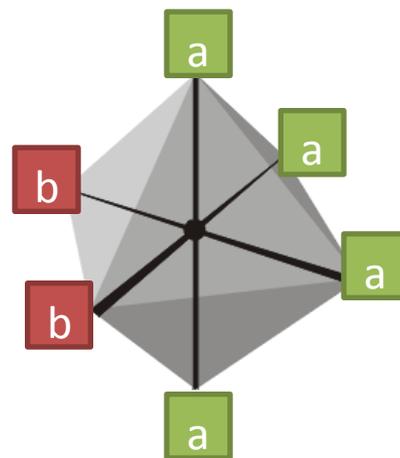


*No tiene isómeros*

***Ma<sub>4</sub>b<sub>2</sub>***

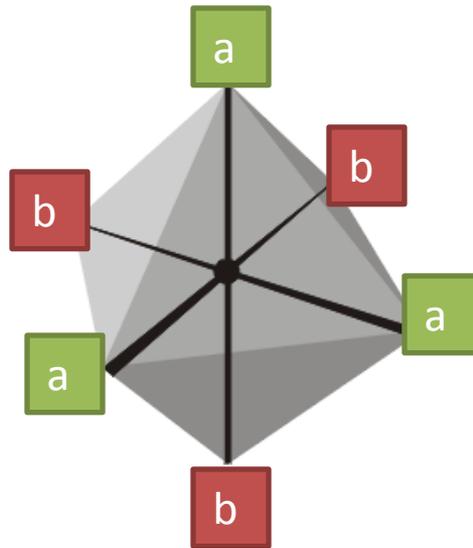


***cis -***

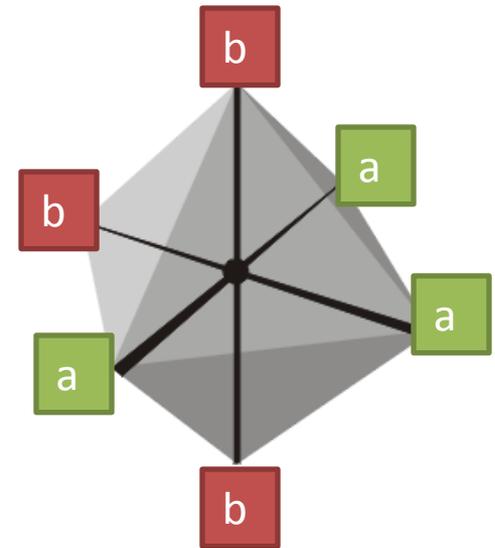


***trans -***

Ejemplo: *cis- ó trans- tetraaminodichlorocobalto (II)*



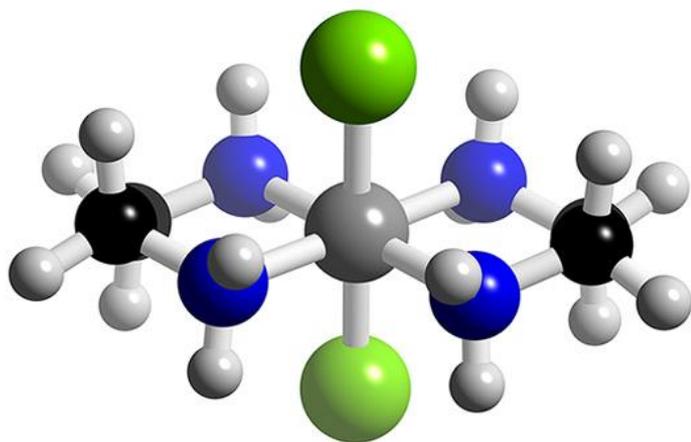
***fac -***



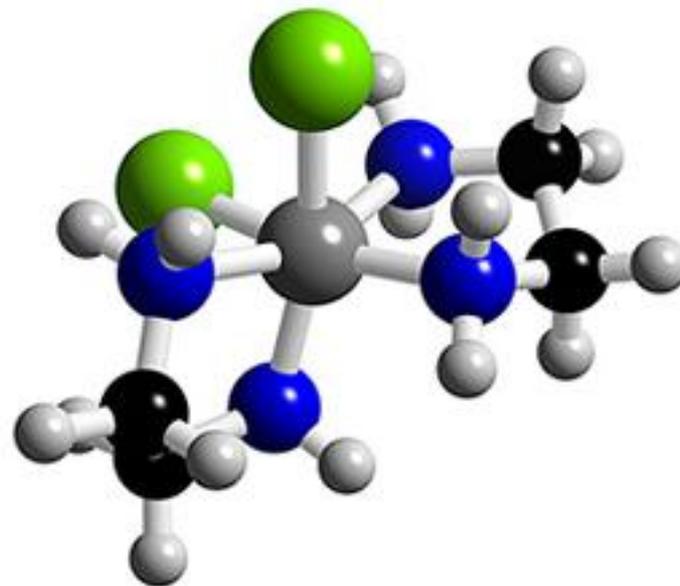
***mer -***

Ejemplo: *cis-/fac- ó trans-/mer- triacuotriclorocromo (III)*

$M(a-a)_2b_2$ ; Ligandos quelato: (en), (acac), ox



*trans – dicloro etilendiamina cobalto (II)*

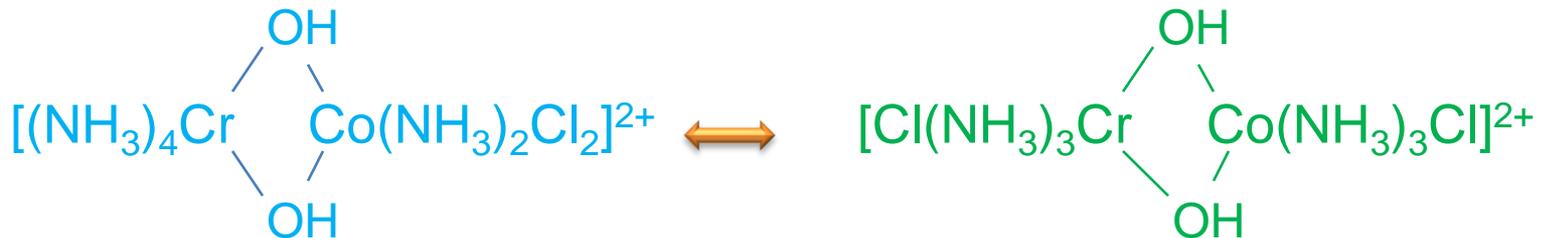


*cis – dicloro etilendiamina cobalto (II)*

# ISÓMEROS ESTRUCTURALES

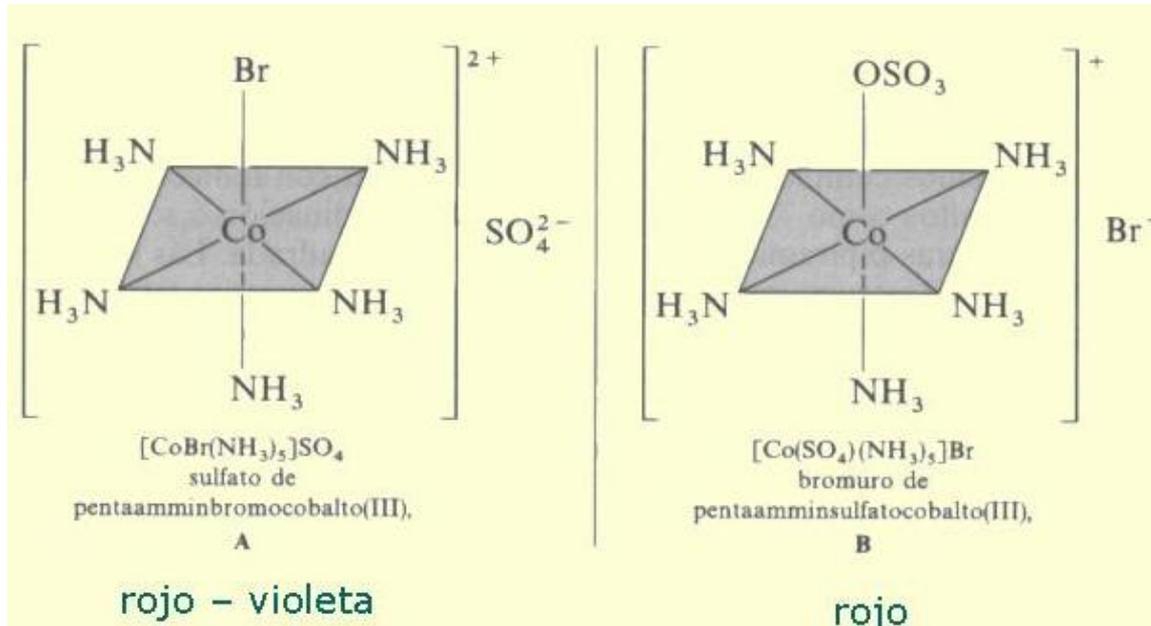
## Isomería de Coordinación

✓ *Compuestos que difieren debido a un intercambio de ligandos entre las esferas de coordinación*



## Isomería de Ionización

✓ *Compuestos que difieren debido a un intercambio de grupos entre las esferas de coordinación y los contraiones.*



✓ [CoCl(en)<sub>2</sub>(NO<sub>2</sub>)]SCN ; [Co(en)<sub>2</sub>(NO<sub>2</sub>)SCN] Cl ; [CoCl(en)<sub>2</sub>SCN ]NO<sub>2</sub>

✓ [Cr(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]Cl<sub>3</sub> ; [Cr(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>Cl]Cl<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O ; [Cr(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>]Cl·2H<sub>2</sub>O



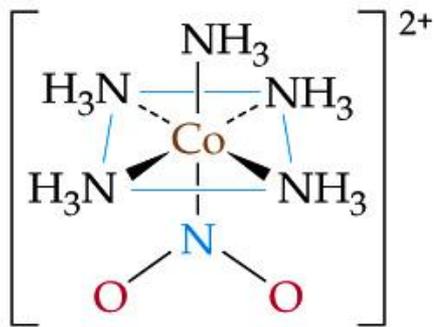
Isómeros de hidratación

## Isomería de Enlace

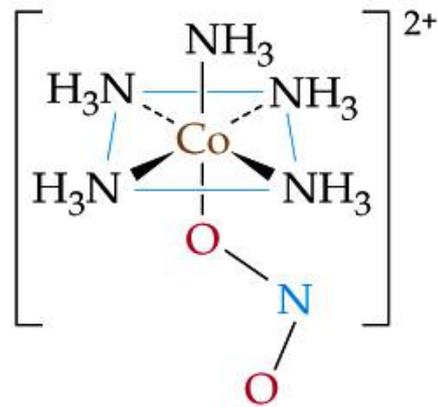
✓ Compuestos que difieren debido a que el ligando presenta un enlace distinto con el metal.

✓ 1894, la preparación diferente del  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{NO}_2)]\text{Cl}_2$  conduce a obtener diferentes colores (**rojo** y **amarillo**) para el compuesto.



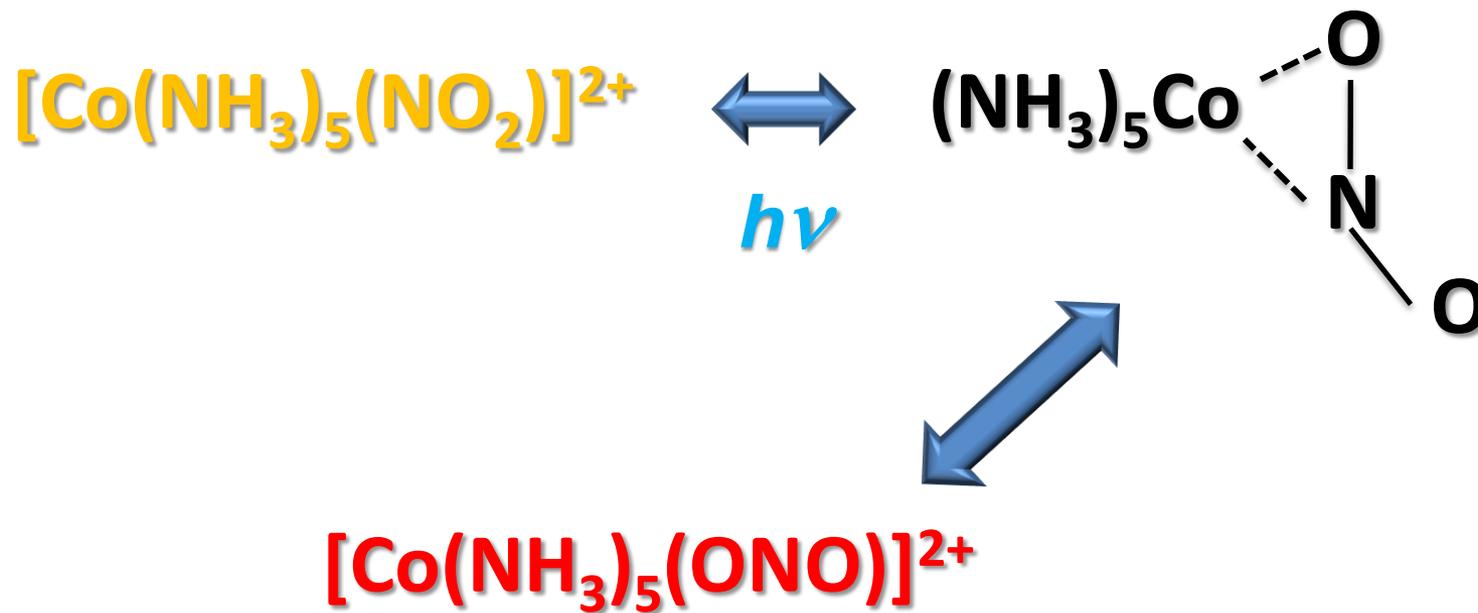


*Nitro*



*Nitrito*

Mecanismo de interconversión intramolecular



✓ **Isómeros de enlace** → ligandos ambidentados ( $\text{NO}_2^-$  ;  $\text{SCN}^-$  ;  $\text{CN}^-$ )

✓ **Tiocianatos:**  $\text{R-S-C}\equiv\text{N}$  ; **Isotiocianatos:**  $\text{R-N=C=S}$

✓ **Nitrilos:**  $\text{R-C}\equiv\text{N}$  ; **Isonitrilos:**  $\text{R-N}\equiv\text{C}$



diciano(trietilenotetramina)Co (III)

diisociano(trietilenotetramina)Co (III)



*No son isómeros*

# Efectos que determinan un tipo de isómero de enlace

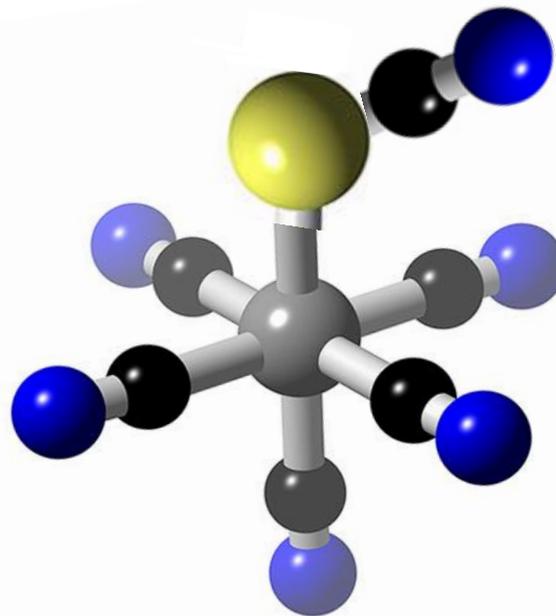
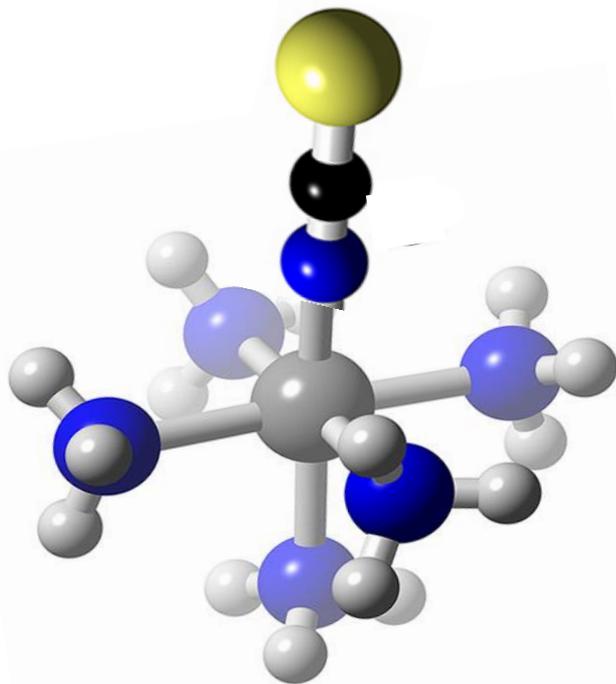
1. Naturaleza del ión metálico
2. Efectos electrónicos y estéricos del ligando ambidentado o de los demás ligandos
3. Disolvente utilizado en la síntesis o en su recristalización.

## Naturaleza del ión metálico

- ✓ Metales de la **clase a** : se unen a ligandos con átomos dadores del 2º período (**N, O, F**)
- ✓ Metales de la **clase b** : se unen a ligandos con átomos dadores de los periodos siguientes (**S, P, Cl**, etc.)
- ✓ Excepciones:  $\text{NO}_2^-$  ;  $\text{CN}^-$



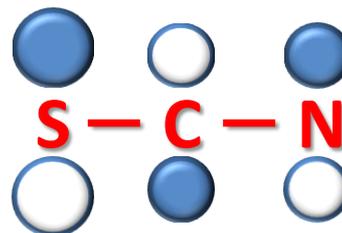
## Efectos estéricos y electrónicos



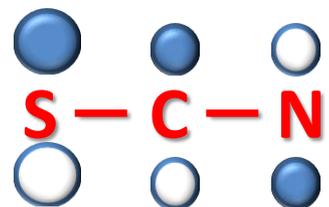
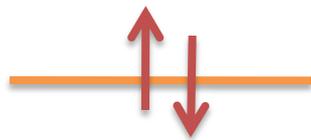
*Sustitución de  $\text{NH}_3$  por  $\text{CN}^-$*

## Efecto electrónico

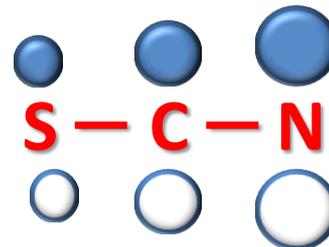
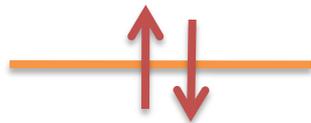
$\pi^*$



$\pi_n$



$\pi$



**M-NCS** → Ligando dador  $\pi$  → **M** sin orbitales  $\pi$  llenos o competencia de **L** en *trans*

**M-SCN** → Ligando aceptor  $\pi$  → **M** con orbitales  $\pi$  llenos

## Efecto estérico

