

Nomenclatura e isomería

Química de Coordinación

Jesús Gracia Mora

Isomería

La evidencia que ***Werner uso para concluir que*** los compuestos hexacoordinados, eran casi invariablemente octaédricos, la obtuvo estudiando la isomería de este tipo de compuestos.

Presentaremos a continuación las formas de isomería que se pueden reconocer al estudiar este tipo de compuestos.

Es importante notar que estas categorías no son mutuamente exclusivas y que se pueden invocar dos o más de las clases de isomería para describir la isomería entre dos compuestos

Isomería

En química de coordinación se reconocen diez clases de isomería.

Estas son:

- Isomería conformacional
- Isomería de la posición de coordinación
- Isomería de coordinación
- Isomería de ionización
- Isomería de hidratación
- Isomería de unión
- Isomería de polimerización
- Isomería geométrica
- Isomería óptica
- Isomería del ligante

Isomería Conformacional

Es en el caso donde en que los isómeros tienen diferente estereoquímica (forma) pero que por lo demás son idénticos

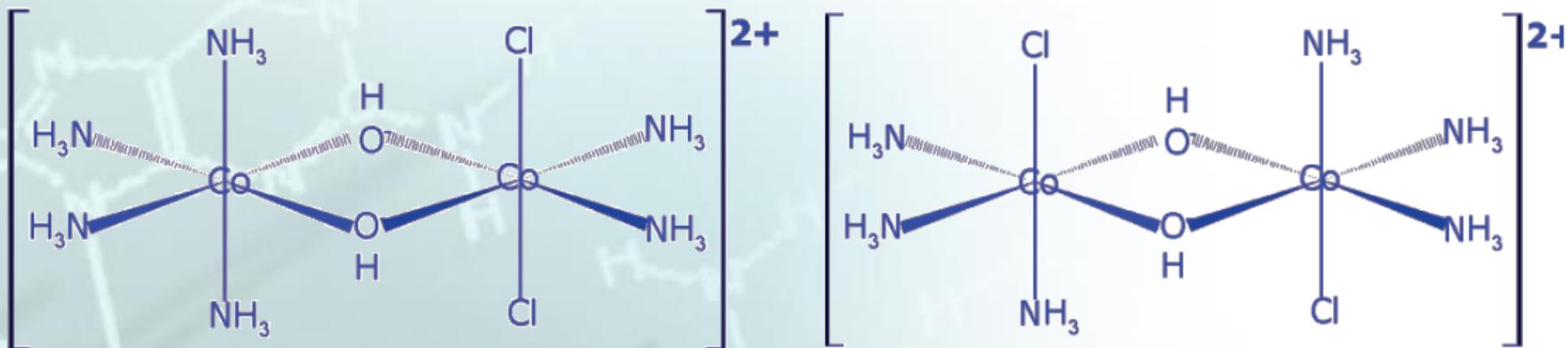
Este tipo de isomería está confinada a muy pocos ejemplos. Así los compuestos:



Pueden ser **tetraédricos** o **planos** dependiendo de las condiciones

Isomería

En este tipo de isomería la distribución de los ligantes entre dos centros de coordinación difiere. Por ejemplo,



Noten que cada uno de los cationes puede presentar varias formas isoméricas

Isomería de coordinación

Solamente se presenta cuando el catión y el anión de una sal son ambos complejos, difiriendo los dos isómeros en la distribución de los ligantes entre el catión y el anión, por ejemplo:



Nótese que el centro de coordinación puede ser el mismo átomo en el catión y el anión



Isomería de Ionización

Dos compuestos de coordinación que difieren en la distribución de los iones coordinados directamente y los contraiones presentes en la red cristalina. Se conocen como isómeros de ionización.

Por ejemplo:



Isomería de cristalización o de solvato

Este caso es similar al de ionización. Excepto que ahora es un ligante sin carga el que cambia de la esfera de coordinación a una posición en la red cristalina y uno de la red pasa a formar parte de la esfera de coordinación.

Por ejemplo:



Isomería de unión

Existen ligantes que se pueden coordinar de más de una manera

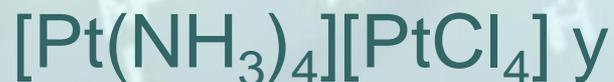
Este fenómeno da lugar a la isomería de unión:



Isomería de polimerización

Se refiere a los complejos en donde el valor de n en la fórmula empírica $[ML_m]_n$ varía.

Tal es el caso del par de complejos



Isomería Geométrica

Esta depende de la geometría que adopta el complejo.

De manera que la isomería que puede tener un complejo, conviene analizarla en estos términos.

Las geometrías que presentan isomerías geométricas importantes son se indican a continuación.

- La tetraédrica
- La cuadrada
- Pirámide cuadrada
- La bipirámide trigonal
- La octaédrica

Cada una de ellas la analizaremos más adelante, pues cada una tiene sus particularidades

Isomería Geométrica

En el caso de la geometría tetraédrica, los complejos cuya composición es



No presentan isomería geométrica, aunque



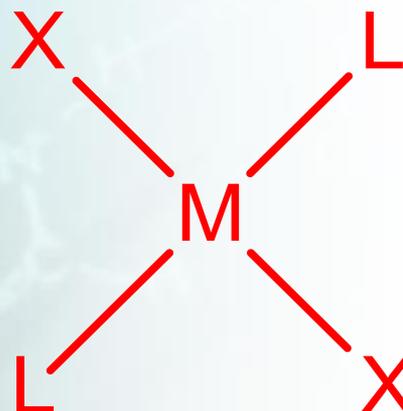
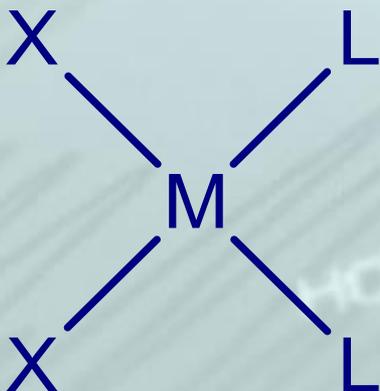
presenta isomería óptica

Isomería geométrica

En el caso de la geometría cuadrada, los complejos cuya composición es ML_4 o ML_3X , no presentan isómeros, sin embargo ML_2X_2

La manera de describir este tipo de isomería es indicando si la posición relativa de los ligantes es adyacente o se encuentran opuestos uno al otro.

En el primer caso etiquetamos con el prefijo *cis* y en el segundo con el prefijo *trans*-

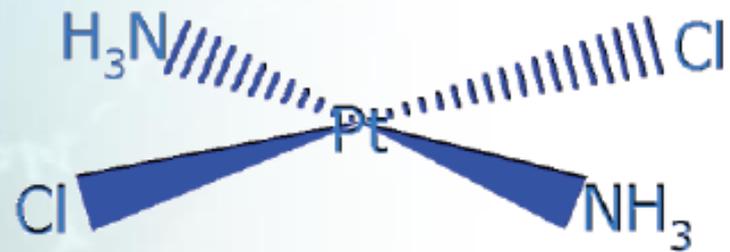


Isomería geométrica

El caso “Cis platino”



cis



trans

Isomería Geométrica

En el caso de los compuestos cuya geometría es piramidal cuadrada, esencialmente hay que distinguir entre los ligantes que se encuentran en la base de la pirámide (**basales**) y los que se encuentran en el vértice de la pirámide (**axiales**)

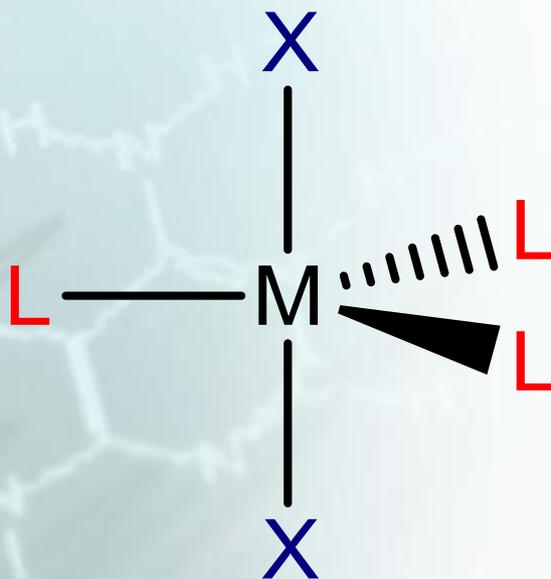
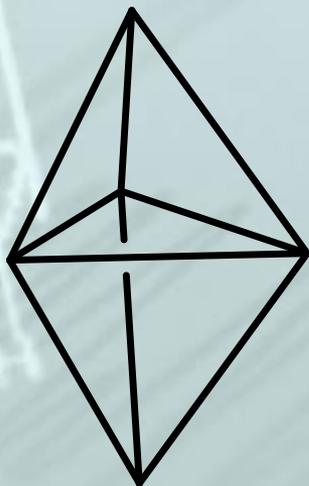


Isomería Geométrica

También para los complejos de geometría bipiramidal trigonal es necesario distinguir a los ligantes que se encuentran en el eje (***axiales***)

de los que se encuentran en la base (***ecuatoriales***)

De las dos pirámides



Isomería Geométrica

El caso de los complejos octaédricos, encontramos que aquellos que tienen las composiciones

ML_6 y
 ML_5X ,
no presentan isómeros

En tanto que los complejos con composiciones

ML_4X_2 ,
 ML_3X_3 ,
 $ML_2X_2Y_2$

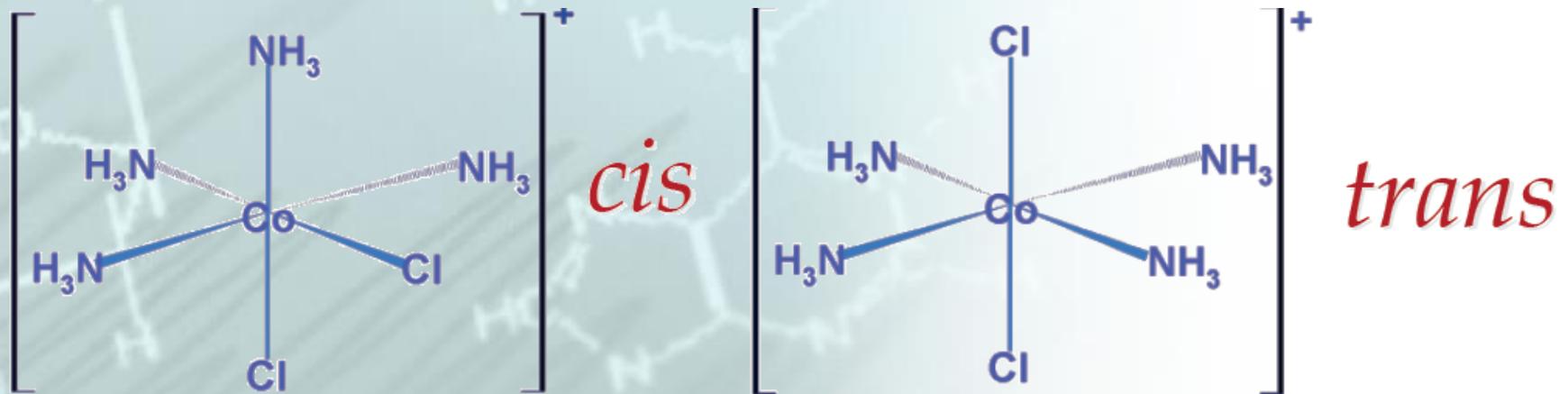
Junto con las composiciones más complejas si presentan isómeros.

Isomería Geométrica

En los casos sencillos es factible describir a los isómeros empleando la posición relativa de los ligantes. Así, para



se utilizan nuevamente los prefijos **cis-** y **trans** para describir si los ligantes se encuentran o no adyacentes. En los complejos de Co(III) de cloro y amoniaco se tiene:



Isomería Geométrica

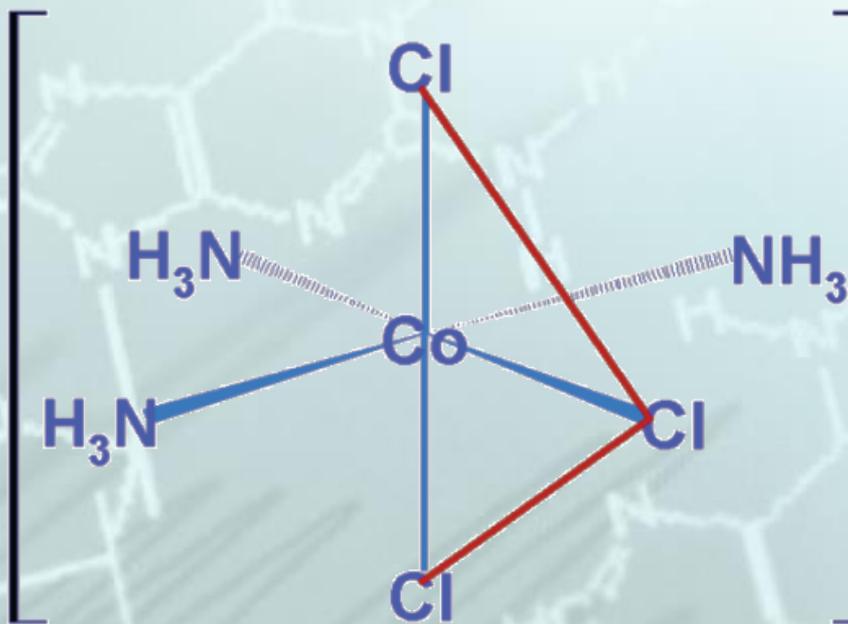
En el caso de los complejos $ML_2X_2Y_2$, el tratamiento es similar, pero ligeramente más complicado, pues ahora debemos indicar las relaciones entre cada par.

Finalmente en el caso de los complejos de composición ML_3X_3 , se puede describir a los isómeros dependiendo si se encuentran en una cara del octaedro o no.

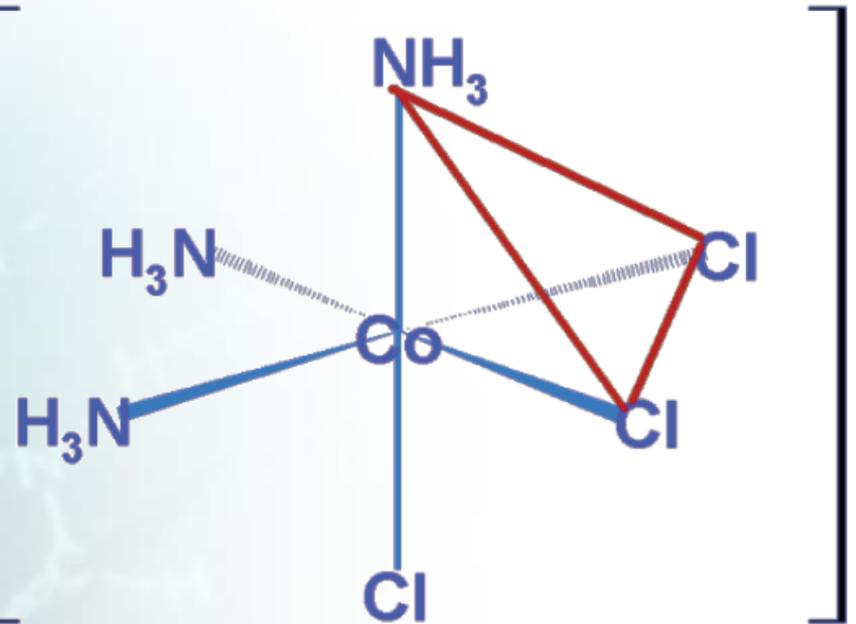
Para ello empleamos los prefijos ***mer-*** (*meridional*) y ***fac-*** (*facial*).

Isomería Geométrica

Así en el caso de los complejos



mer (meridional)



fac (facial)

Isomería Óptica

Un compuesto que no se puede superimponer a su imagen especular, se le llama **quiral**

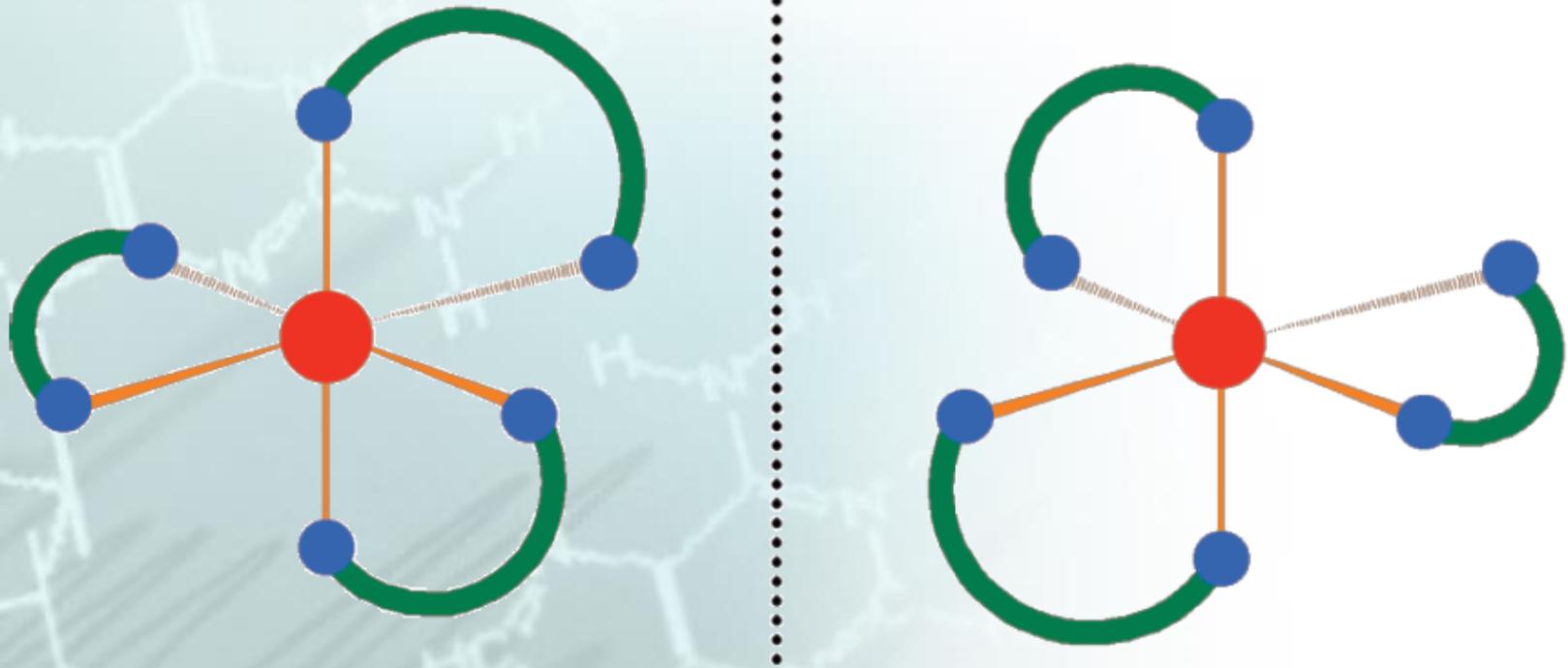
A un par de complejos **quirales distintos que son** imágenes especulares uno del otro, se les llama **enantiómeros**

Y se dice que son **isómeros ópticos**. El adjetivo **óptico procede de la capacidad que tiene** cada isómero de rotar el plano de la luz polarizada en direcciones opuestas pero con la misma magnitud.

Los complejos tetraédricos cuya composición es MLXYZ, tal como los compuestos de carbono con cuatro sustituyentes diferentes tienen esta Propiedad.

Isomería Óptica

Esta misma propiedad la presentan también los complejos octaédricos, siempre y cuando tengan ligantes *quelatos*



Espejo

Nomenclatura

Para podernos comunicar, una de las mejores estrategias es la de tener una convención aceptable para la mayoría.

Esta convención procede de la *Unión Internacional de Química Pura y Aplicada* o *International Pure & Applied Chemistry (IUPAC)*.

Aunque esta convención se acepta comúnmente, a veces encontraremos variantes.

En general es recomendable y más simple dar la fórmula estructural que escribir el nombre completo.

Nomenclatura

Adicionalmente los nombres triviales de muchos de estos compuestos persisten.

Y aunque debiéramos referirnos a los aniones de hierro y CN- cómo:

hexacianoferrato(II) y

hexacianoferrato(III)

muchos autores se siguen refiriendo a estos como

ferrocianuro y

Ferricianuro

respectivamente

Nomenclatura

También nos encontraremos muchos ejemplos de complejos que tienen nombre de humano, tales como:

sal de Reinecke $\text{NH}_4[\text{Cr}(\text{NH}_3)_2(\text{NCS})_4]$

o la **sal verde de Magnus** $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4][\text{PtCl}_4]$

o la **sal de Zeiss** $\text{K}[\text{Pt}(\text{C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_3]$.

Un sistema que afortunadamente ha desaparecido pero que es factible que se encuentren en la literatura antigua consiste en:

nombrar al complejo de acuerdo al color del complejo de cobalto (III) correspondiente, ¡sin importar el color del propio complejo!

Por ejemplo las sales purpúreo son todas aquellas que cumplen esta fórmula: $[\text{M}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{n+}$

Nomenclatura

Las siguientes reglas resumen las decisiones más importantes del comité de nomenclatura de la IUPAC:

1. Al escribir la fórmula de un complejo, el átomo central se pone primero: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$

a. Pero al nombrarlo el metal va al final hexacianoferrato(III)

b. Si el complejo es aniónico se debe terminar con el sufijo -ato,

c. Esta distinción en los aniones se hace para poder nombrar sistemáticamente a los ácidos correspondientes

Nomenclatura

d. Si el complejo es neutro o catiónico el nombre del elemento central no se modifica, así

$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ es hexaacuohierro(II).

e. El estado de oxidación formal del átomo central se indica con el número romano correspondiente encerrado entre paréntesis pero sin espacio entre este y el nombre.

f. Un estado de oxidación formal de cero, se indica con (0)

g. Y los números de oxidación negativos, con el signo menos y el número romano (-II)

Nomenclatura

2. El nombre de una especie compleja se escribe como una sola palabra
3. En la fórmula se presentan primero los ligantes positivos, después los neutros y finalmente los negativos
 - a. Pero al escribirlos, el nombre de los complejos se escribe en una sola palabra
 - b. Si los ligantes en el complejo son moléculas neutras se usa su nombre normal, excepto para el amoniacó que se escribe amin y el agua que se escribe acuo

Nomenclatura

c) Si los ligantes son negativos sus nombres se terminan con el sufijo -o.

d) Al listar los ligantes primero se escriben los negativos, después a los ligantes neutros y finalmente los cargados positivamente

e) Dentro de cada clase se pondrán en orden de complejidad, primero los simples después los complicados

f) Así el complejo $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{NO}_2)\text{Br}]^+$ se nombra como:

bromonitrotetraamincobalto(III)

Nomenclatura

g. En general las moléculas neutras se nombran empleando el nombre de la molécula, aunque existen algunas excepciones, las más importantes

H_2O = acuo,

NH_3 = amin,

CO = carbonilo,

NO = nitrosilo

h. Si el ligante puede unirse al metal de varias maneras, debe indicarse el átomo coordinado después del ligante.

Nomenclatura

En el caso de NO_2^- y SCN^- se puede emplear cualquiera de sus nombres alternativos:

$-\text{NO}_2^-$ = nitro

$-\text{ONO}^-$ = nitrito

por un lado y:

$-\text{SCN}^-$ = tiocianato

$-\text{NCS}^-$ isocianato.

Nomenclatura

4. Cuando varios ligantes se coordinan al mismo átomo central, se tienen dos casos

a. Si los ligantes son simples, el número de ligantes unidos se indica por medio de los prefijos latinos:

mono-,
di-,
tri-,
tetra-,
penta-,
hexa-, etc.

$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ = hexaacuohierro(II),

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ = diclorotetraamincobalto(III)

Nomenclatura

b. Si los ligantes son más complicados y tienen prefijos para designar su estructura, se emplean los prefijos griegos:

bis-,

tris-,

tetrakis-,

pentakis-,

hexakis-.

$[\text{Ni}(\text{en})_3]^{2+}$ trisetilendiaminiquel(II)

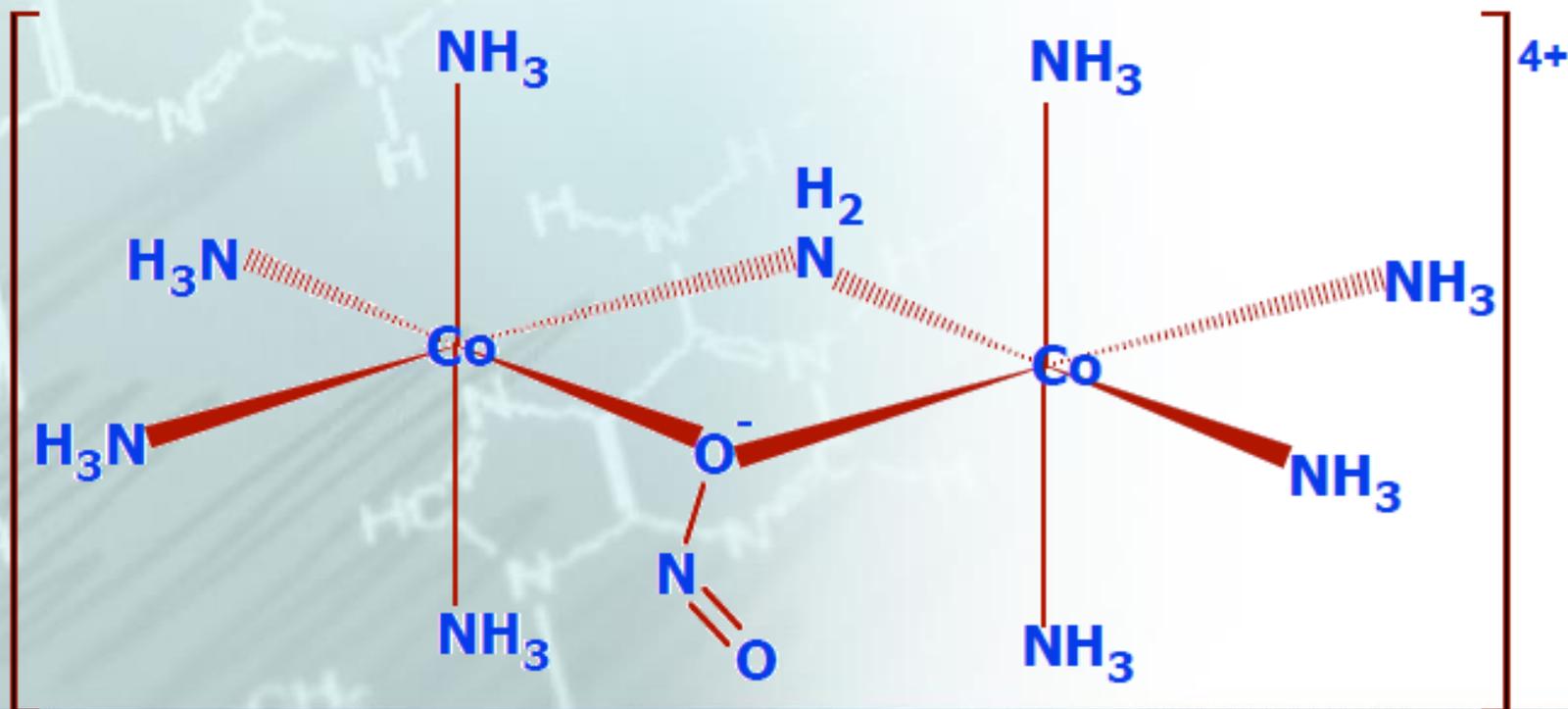
(en = etilendiamina)

$[\text{Co}(\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{Cl}_2)]$

diclorobistrifenilfosfincobalto(II)

Nomenclatura

5. Si hubieran grupos formando un puente entre dos centros de coordinación del mismocompuesto, deben indicarse con la letra griega μ : μ -amido- μ -nitrooctaamindicobalto(III)



Nomenclatura

6. Cuando el ligante usa dos o más átomos vecinos para unirse al metal, se emplea la letra griega η con un superíndice indicando el número de átomos empleados:



se llama tricloro- η^2 -etenoplatino(IV)

7. En el caso de tener isomería geométrica es necesario indicarla

8. Recuerden también que en nuestro lenguaje el nombre de una especie catiónica (compleja o no) siempre va después de una especie aniónica (compleja o no)
