

## Tema 17: Caracteres generales de los compuestos de coordinación

- 17.1 Compuestos de coordinación
- 17.2 Número de coordinación
- 17.3 Ligandos
- 17.4 Isomería
- 17.5 Enlace
- 17.6 Teoría del campo cristalino
- 17.7 El color en los complejos
- 17.8 Aplicaciones biológicas

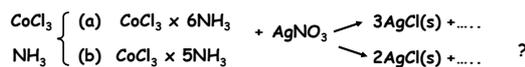
29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

1

## 17.1. Compuestos de coordinación

Son compuestos estables capaces de existir independientemente y que aún así se combinan entre ellos para formar otro compuesto estable



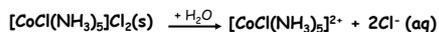
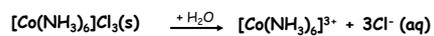
Teoría de los compuestos  
de coordinación de Werner (1893)

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

2

## Teoría de los compuestos de coordinación de Werner (1893)



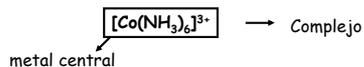
La teoría de Werner establece que algunos átomos metálicos tienen dos tipos de valencia (capacidad de enlace). La primaria, basada en el número de electrones que el átomo pierde para formar el ión metálico y la secundaria, responsable del enlace con otros compuestos -los ligandos- al ión metálico central.

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

3

Un complejo [ ] es cualquier especie que implica coordinación de ligandos a un metal central



Un compuesto de coordinación es un compuesto complejo o que contiene iones complejos.



Ejemplos:



29/03/2006

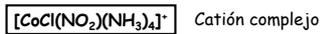
Fundamentos de Química  
Tema 17

4

### 17.2. Número de coordinación

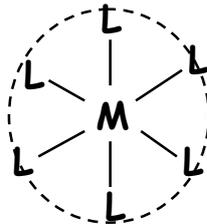
El número de coordinación de un complejo es el número de posiciones en las que se pueden formar enlaces con ligando alrededor del átomo central. El más frecuente es el 6 y después el 4.

Ejemplo



6 ligandos ----> número de coordinación 6

Átomo central con estado de oxidación (+3)

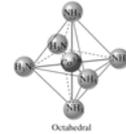
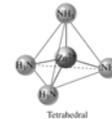


Esfera de coordinación

### Geometrías y números de coordinación

TABLE 25.1 Some Common Coordination Numbers of Metal Ions

$\text{Cu}^+$	2, 4	$\text{Al}^{3+}$	4, 6
$\text{Ag}^+$	2	$\text{Se}^{3+}$	6
$\text{Au}^+$	2, 4	$\text{Cr}^{3+}$	6
$\text{Fe}^{2+}$	6	$\text{Fe}^{3+}$	6
$\text{Co}^{2+}$	4, 6	$\text{Co}^{3+}$	6
$\text{Ni}^{2+}$	4, 6	$\text{Au}^{3+}$	4
$\text{Cu}^{2+}$	4, 6	$\text{Pt}^{2+}$	6
$\text{Zn}^{2+}$	4		
$\text{Pt}^{2+}$	4		



### 17.3. Ligandos

#### Complejos

Neutros  
Aniónicos  
Catiónicos

#### Ligandos

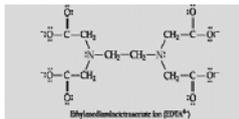
Neutros  $\text{H}_2\text{O}$   
Aniónicos  $\text{Cl}^-$   
(Catiónicos)  $\text{NO}^+$

Los ligandos: Son bases de Lewis que ceden pares de  $e^-$  a los átomos o iones metálicos centrales, que actúan a su vez como ácidos de Lewis

Ligandos monodentados ( $2e^-$ )

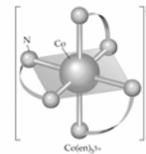
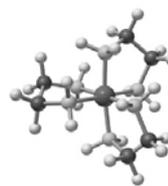


Polidentados (más de  $2e^-$ )



Ejemplo de ligando hexadentado

Cuando un ligando polidentado se enlaza a un ión metálico se forma un anillo, normalmente de cinco o seis miembros, y el complejo se llama quelato. El ligando polidentado se llama agente quelatante y el proceso quelatación

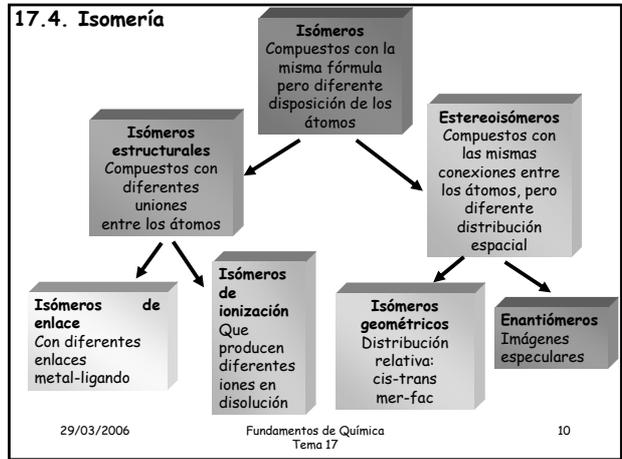


**LIGANDOS**

H <sub>2</sub> O ACUO	NH <sub>3</sub> AMIN(O) CO CARBONILO
F <sup>-</sup> FLUORO	CN <sup>-</sup> CIANO
Cl <sup>-</sup> CLORO	SCN <sup>-</sup> TIOCIANATO
Br <sup>-</sup> BROMO	NCS <sup>-</sup> ISOTIOCIANATO
I <sup>-</sup> YODO	NH <sub>2</sub> AMIDO
O <sup>2-</sup> OXO	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup> PEROXO O <sub>2</sub> <sup>-</sup> SUPEROXO
OH <sup>-</sup> HIDROXO	O <sub>2</sub> DIOXÍGENO
N <sub>2</sub> DINITRÓGENO	H <sub>2</sub> DIHIDRÓGENO
PR <sub>3</sub> FOSFINA	NO NITROSIL(O)
CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> ETILENO	
H <sub>2</sub> NCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> ETILENODIAMINA en	

PIRIDINA py                      ACETILACETONATO acac

29/03/2006                      Fundamentos de Química                      9  
Tema 17



### Isómeros de enlace

(a)                      (b)

29/03/2006                      Fundamentos de Química                      11  
Tema 17

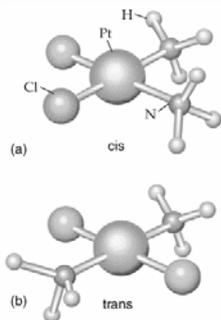
### Isómeros de ionización

A                      B

rojo - violeta                      rojo

29/03/2006                      Fundamentos de Química                      12  
Tema 17

### Isómeros geométricos

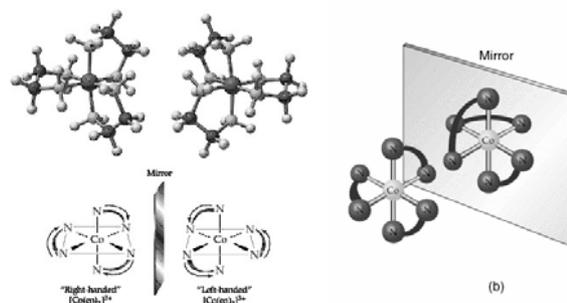


29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

13

### Isómeros ópticos



### Enantiómeros (son quirales)

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

14

## 17.5. Enlace de los compuestos de coordinación

La teoría del enlace de valencia (estudiada en el tema 7) también se puede utilizar para describir el enlace en los iones complejos.

En la formación de iones complejos, los orbitales llenos de los ligandos se hibridan con el orbital vacío del ión metálico. Según este modelo el número y el tipo de los orbitales híbridos metal-ion ocupados por pares libres de los ligandos determina la geometría del ión complejo.

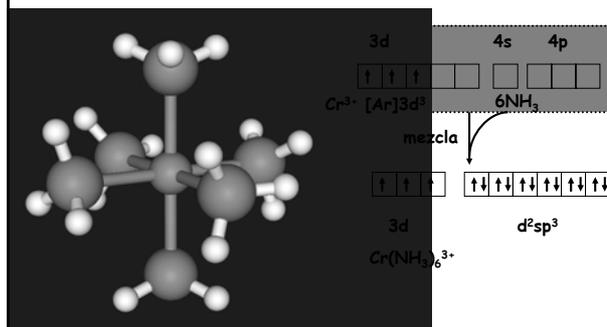
Hibridación	Complejos
$sp^3$	Tetraédrico
$dsp^2$	Plano cuadrado
$d^2sp^3$	Octaédrico

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

15

### 17.5.1. Complejos octaédricos

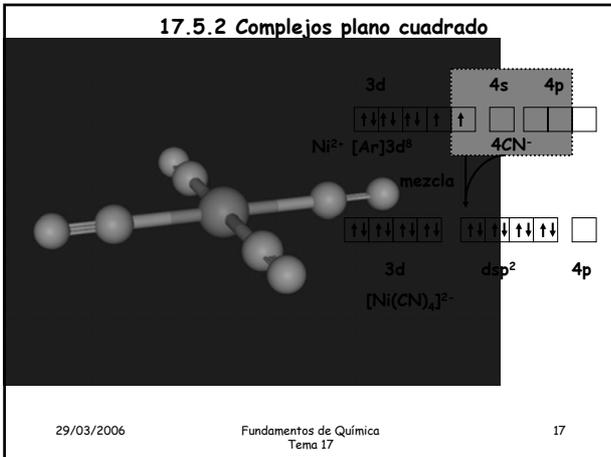


29/03/2006

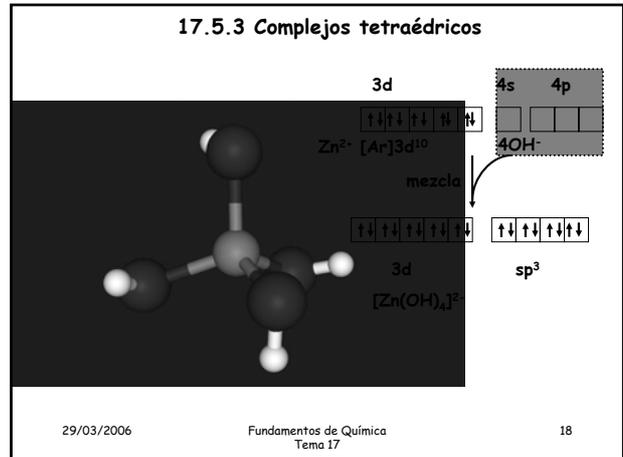
Fundamentos de Química  
Tema 17

16

### 17.5.2 Complejos plano cuadrado



### 17.5.3 Complejos tetraédricos



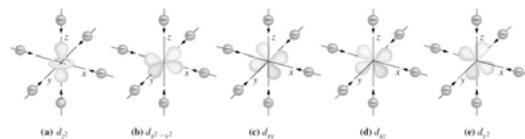
### 17.6 Teoría del campo cristalino

La teoría del campo cristalino proporciona poca información sobre el enlace metal-ligando, pero explica los colores y el magnetismo.

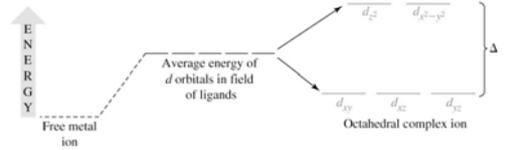
Esta teoría se centra en las repulsiones entre los electrones de los ligandos y los electrones  $d$  del átomo central

La repulsión entre los electrones de los ligandos y los electrones  $d$  del átomo central hace que los niveles de energía de los orbitales  $d$  del átomo central aumenten, pero no lo hacen todos de la misma manera

### 17.6.1 Complejo octaédrico



#### $\Delta$ Desplazamiento del campo cristalino



P

Regla de Hund Consideramos la energía de emparejamiento

$\Delta > P$   $\Delta < P$

espín bajo espín alto

29/03/2006 Fundamentos de Química Tema 17 21

Los distintos ligandos pueden clasificarse en función de su capacidad para producir un desplazamiento de los niveles de energía d. Esta clasificación se conoce como serie espectroquímica

$\Delta$  grande  
Ligandos de campo fuerte

$CN^- > NO_2^- > en > py \cong NH_3 > EDTA^{4-} > SCN^- > H_2O >$

$ONO^- > ox^{2-} > OH^- > F^- > SCN^- > Cl^- > Br^- > I^-$

$\Delta$  pequeño  
Ligandos de campo débil

29/03/2006 Fundamentos de Química Tema 17 22

Dos complejos d<sup>7</sup>

**Campo fuerte**

**Campo débil**

**Complejo de espín alto**  $[CoF_6]^{3-}$   $\Delta < P$

**Complejo de espín bajo**  $[Co(NH_3)_6]^{3+}$   $\Delta > P$

29/03/2006 Fundamentos de Química Tema 17 23

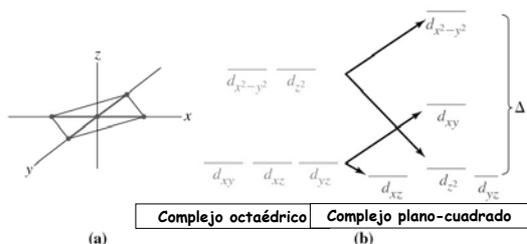
17.6.2 Complejo tetraédrico

Energía media de los orbitales de en el campo de los ligandos

(a) (b)

29/03/2006 Fundamentos de Química Tema 17 24

### 17.6.3 Complejo plano-cuadrado



29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

25

### 17.7 Los colores de los complejos

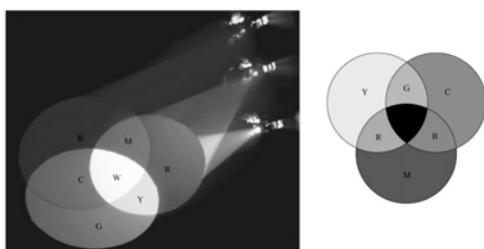
- Colores primarios
  - Rojo (R), verde (G) y azul (B).
- Colores secundarios:
  - Se obtienen al mezclar colores primarios
- Colores complementarios:
  - Los colores secundarios son complementarios de los primarios
  - Azul turquesa (C), amarillo (Y) y malva (M)
  - Añadiendo un color a su complementario obtenemos blanco (W)

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

26

### 17.7 Los colores de los complejos

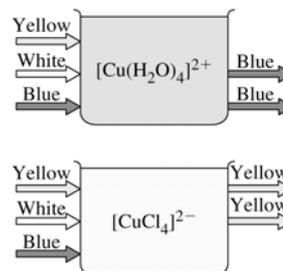


29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

27

Ejemplo: El ion  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$  absorbe en la región amarilla del espectro y transmite luz azul. El ion  $[\text{CuCl}_4]^{2-}$  absorbe en la región azul del espectro y transmite luz amarilla

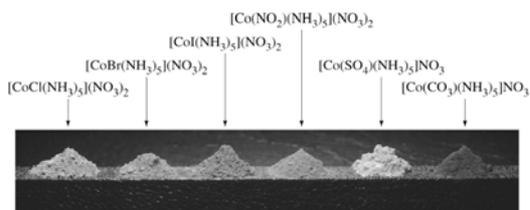


29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

28

**Efecto de los ligandos sobre el color de los compuestos de coordinación**

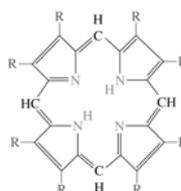


29/03/2006

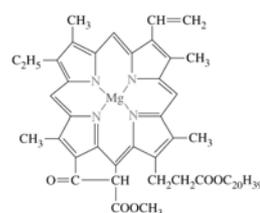
Fundamentos de Química  
Tema 17

29

**17.8 Aplicaciones biológicas. Porfirinas**



Estructura de la porfirina



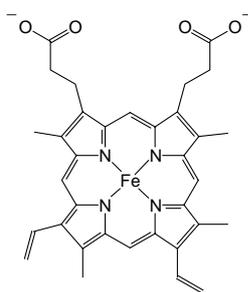
Estructura de la clorofila a

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

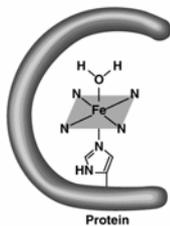
30

**17.8 Aplicaciones biológicas. Porfirinas**



Reynold Chang, Chemistry, Inc. Copyright © 1988 The McGraw-Hill Companies, Inc. All rights reserved.

**Heme Group in Hemoglobin**



**Protein**

Grupo hemo (hemoglobina, mioglobina, citocromos, catalasas, peroxidasas....)

29/03/2006

Fundamentos de Química  
Tema 17

31