



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Aproximación a la química de los compuestos de coordinación y su enseñanza en educación media

Erdy Yesid Alfonso Parada

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias

Maestría en la Enseñanza de las Ciencias Exactas y Naturales

Bogotá, D.C., Colombia

2012

Aproximación a la química de los compuestos de coordinación y su enseñanza en educación media

Erdy Yesid Alfonso Parada

Trabajo Final presentado como requisito parcial para optar al título de:
Magister en la Enseñanza de las Ciencias Exactas y Naturales

Director:

Jesús Sigifredo Valencia Ríos, Dr. Sc.

Profesor Titular

Departamento de Química

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ciencias

Maestría en la Enseñanza de las Ciencias Exactas y Naturales

Bogotá, D.C., Colombia

2012

Dedicatoria

A la memoria de mi madre (Q.E.P.D) como reconocimiento de su amor, dedicación y empeño por nuestra educación.

A mi padre por su permanente acompañamiento. Sus huellas son la luz que hoy me guían en cada acción de mejoramiento.

A mi esposa, Olga Hedit, y mis hijos, Alexandra y Daniel Leonardo, las razones de ser de mi vida.

Resumen

Los compuestos de coordinación son entidades químicas bien definidas formadas por un átomo central y un grupo de átomos o moléculas denominados ligandos, que por presentar un orbital *d* parcialmente lleno forman enlaces covalentes. A partir de los trabajos de Werner, se han desarrollado diversas teorías para describir su naturaleza, geometría y propiedades.

Los compuestos de coordinación son importantes por su uso en diferentes industrias, análisis químico, medicina, arte; además, forman parte esencial en organismos vivos. No obstante, algunos complejos son tóxicos y sus residuos contaminan el medio ambiente. Este estudio hace una aproximación conceptual a la química de los compuestos de coordinación, en la vía de comprender la importancia práctica de estas sustancias, su estructura química y los posibles efectos medio ambientales.

Palabras claves: Química, complejos de metales, metales pesados, ligandos.

Abstract

Coordination compounds are well-defined chemical entities formed by a central atom and a group of atoms or molecules called ligands, which present a partially filled *d* orbital forming covalent bonds. From the work of Werner, several theories have been developed to describe its nature, geometry and properties.

Coordination compounds are important due to its use in different industries, chemical analysis, medicine, art, moreover, are an essential part in living organisms. However, some complexes are toxic and their residues pollute the environment. The study provides

a conceptual approach to the chemistry of coordination compounds, in the way of understanding the practical importance of these substances, their chemical structure and potential environmental effects.

Keywords: Chemistry, metal complexes, heavy metals, ligands.

Contenido

	Pág.
Resumen	VII
Lista de figuras	XI
Lista de tablas	XII
Introducción	1
1. Compuestos de coordinación	3
1.1 Naturaleza del enlace en las entidades de coordinación	4
1.2 Teoría de la hibridización	5
1.3 Iones metálicos.....	6
1.4 Ligandos	7
1.4.1 Ligandos monodentados	7
1.4.2 Ligandos polidentados	9
1.5 Quelatos.	10
1.6 Iones complejos.....	11
1.7 Compuestos de coordinación neutros	11
2. Desarrollo epistemológico de los compuestos de coordinación	13
3. Formación de compuestos de coordinación y constantes de estabilidad	19
3.1 Factores que afectan la estabilidad del complejo.....	22
4. Geometría de los compuestos de coordinación	23
4.1 Isomería de las entidades de coordinación	24
4.1.1 Estereoisomería de entidades de coordinación.....	25
4.1.2 Isomería óptica de entidades de coordinación	26
4.1.3 Isomería estructural y de esfera de coordinación.....	28
5. Teorías de formación de complejos	29
5.1 Teoría del campo cristalino (TCC)	29
5.2 Teoría del enlace de valencia	31
5.3 Teoría de orbitales moleculares (OM).	32
5.4 Teoría del campo ligando (TCL).	34
6. Nomenclatura de los compuestos de coordinación	37
7. Aplicaciones e impacto ambiental de los compuestos de coordinación	41
7.1 Impacto ambiental de las entidades de coordinación.....	42

8. Propuesta metodológica para la enseñanza de compuestos de coordinación..	45
A. Anexo: Taller experimental de aula.....	47
9. Conclusiones y recomendaciones	55
9.1 Conclusiones	55
9.2 Recomendaciones.....	56
Bibliografía	57

Lista de figuras

Figura 1.. Trioxalato de hierro(III).....	4
Figura 2. Estructura cuadrado planar del cis-diaminodicloroplatino(II).	4
Figura 3. Formación del ion NH_4^+ en términos de estructuras de Lewis.	5
Figura 4. Hidruro tetracarbonilo de cobalto.....	7
Figura 5. Carbonato tetraammincobalto(III).	8
Figura 6. Ejemplo de ligando ambidentado.....	9
Figura 7. Ligandos bidentados comunes.	9
Figura 8. Ligandos polidentados típicos.....	10
Figura 9. Grupo hemo de la hemoglobina.....	10
Figura 10. Formación del ion complejo hexaminocobalto(III).	11
Figura 11. Ilustración estereográfica del isómero (a) <i>cis</i> y (b) <i>trans</i> del $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$. .	25
Figura 12. Ilustración estereográfica del isómeros <i>fac</i> (a) y <i>mer</i> (b) del $[\text{CoCl}_3(\text{NH}_3)_3]$	26
Figura 13. Isómeros ópticos, (a) Λ y (b) Δ , del $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$	27
Figura 14. Isómeros ópticos, (a) Λ y (b) Δ , del <i>cis</i> - $[\text{CoCl}_2(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{---CH}_2\text{NH}_2)_2]^+$	27
Figura 15. Diagrama de separación de energía en un complejo de estructura octaédrica.	31
Figura 16. Espectro de absorción del $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$	34

Lista de tablas

Tabla 1: Ligandos monodentados.	8
Tabla 2. Constantes de formación de algunos compuestos de coordinación en condiciones termodinámicas estándar.	21
Tabla 3. Arreglos espaciales de algunos compuestos de coordinación asociados al número de coordinación.	24
Tabla 4. Funciones de onda “orbitales híbridos”, obtenidos por combinación lineal de funciones de onda de “orbitales atómicos” de valencia.	33
Tabla 5. Formulación y color de algunas entidades de coordinación.	35

Introducción

Sin considerar los gases nobles que se encuentran libres en la naturaleza, los demás elementos se presentan en forma de compuestos unidos por medio de enlaces químicos. La química identifica enlaces iónicos, covalentes y metálicos. A nivel de educación media se hace énfasis en los enlaces de tipo iónico y covalente, así como en los compuestos formados a partir de éstos, mientras los demás tipos de enlace se estudian de manera tangencial a pesar de que todos los elementos pueden formar enlaces de coordinación, por cuanto presentan orbitales libres capaces de albergar pares de electrones.

De acuerdo con la IUPAC, un complejo es una entidad formada por una asociación libre de dos o más especies moleculares (neutras o iónicas). Debido a que el término “complejo” puede tener distintos significados en diversos contextos, en química inorgánica se recomienda utilizar la denominación “entidad de coordinación” (compuesto de coordinación) para referirse a un complejo. En este sentido, una entidad de coordinación es un ensamblaje (ordenamiento) que consiste de un átomo central (metal o ion metálico) rodeado de un arreglo de otros átomos ó de grupos de átomos denominados ligandos.

En su estado la natural, los cationes metálicos (tanto de los metales representativos como de los metales de transición), se encuentran formando alguna entidad de coordinación que los estabiliza; con mucha frecuencia tal compuesto de coordinación involucra el disolvente, v. gr. agua, por lo que tales especies existen en forma de hidratos. En efecto, las sales solubles de muchos metales se encuentran hidratadas en la medida en que, respecto al catión, las moléculas de agua, que disponen de pares electrónicos no compartidos, se enlazan al metal a manera de ligandos.

Aunque gran parte de la química de los compuestos de coordinación hace referencia a entidades de coordinación que se forman por interacción de cationes metálicos con ligandos, vale aclarar que también existen asociaciones en las cuales el núcleo de coordinación es un átomo metálico neutro, una molécula o un anión.

Teniendo en cuenta que la escuela debe facilitar las condiciones para que sus estudiantes accedan a la comprensión de los saberes científicos, desde un enfoque integral, que les permita apreciar la importancia y el uso del conocimiento como herramienta para la generación de riqueza y bienestar social, este trabajo tiene como objetivo central hacer una aproximación conceptual y epistemológica a la química de los compuestos de coordinación, desde la perspectiva del equilibrio químico, en la vía de comprender la importancia práctica de estas sustancias.

Con conocimiento de que cualquier elemento puede formar compuestos de coordinación, se hace énfasis en los elementos de la primera serie de transición de la tabla periódica, así como de otros elementos representativos; luego, se presenta una descripción de los compuestos de coordinación considerando las diferentes teorías propuestas para explicar la formación, el color y otras propiedades de estas entidades químicas; posteriormente se presenta una relación del desarrollo epistemológico de este concepto, así como la descripción de sus propiedades geométricas, su estabilidad, la nomenclatura, sus aplicaciones industriales y el impacto que causa al medio ambiente. Finalmente, este trabajo se complementa con una práctica de laboratorio de determinación de iones de hierro en aguas de formación.

La información aquí presentada corresponde en esencia a una amplia consulta en diferentes fuentes bibliográficas encargadas del tema, del análisis y discernimiento de la información; con lo cual, se espera hacer un aporte al proceso de enseñanza – aprendizaje de este esquivo tema en la educación secundaria.

1. Compuestos de coordinación

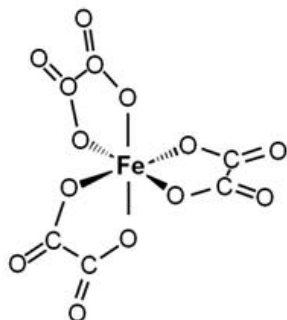
Un compuesto de coordinación, entidad de coordinación, complejo, (o quelato), es una sustancia química constituida típicamente por un átomo central, con orbitales de valencia desocupados, rodeado por iones o moléculas con pares de electrones no compartidos que se transfieren a los orbitales vacíos del átomo central para formar enlaces covalentes. Se trata pues, de una entidad química bien precisa, con propiedades físicas y químicas definidas, diferentes de las del ion metálico y distintas de los ligandos que la constituyen.

El átomo central, también llamado “núcleo de coordinación”, corresponde principalmente a iones metálicos (aunque puede ser un catión, un átomo neutro e inclusive un anión), los cuales actúan como ácidos de Lewis, rodeados de un arreglo de moléculas o aniones denominados ligandos, que intervienen como bases de Lewis aportando pares electrónicos.

En su estado la natural, los cationes metálicos (tanto de los metales representativos como de los metales de transición), se encuentran formando alguna entidad de coordinación que los estabiliza; con mucha frecuencia tal compuesto de coordinación involucra el disolvente, *v. gr.* agua, por lo que tales especies existen en forma de hidratos. En este sentido, las sales solubles de muchos metales se encuentran hidratadas en la medida en que, respecto al catión, las moléculas de agua, que disponen de pares electrónicos no compartidos, se enlazan al metal a manera de ligandos.

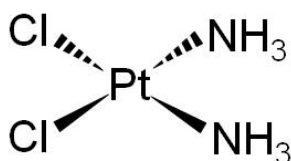
De acuerdo con la estructura electrónica el átomo central puede formar varios enlaces; a este número de uniones se le conoce como número de coordinación (N). Por ejemplo, en el trioxalato de hierro (III), $[\text{Fe}(\text{OOC-COO})_3]^{3-}$, el número de coordinación del hierro es seis, (N=6).

Figura 1.. Trioxalato de hierro(III)



En sí mismo un compuesto de coordinación puede tener la apariencia de ion (ion complejo); un catión como el hexaaminocobalto(III⁺), $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$; un anión como el hexacianoferrato(III), $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$, un anión como el hexaclorocobaltato(III), $[\text{CoCl}_6]^{3-}$; una molécula neutra como el cis-diaminodicloroplatino(II), $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$.

Figura 2. Estructura cuadrado planar del cis-diaminodicloroplatino(II).



1.1 Naturaleza del enlace en las entidades de coordinación

Existe un tipo de enlace que se forma cuando interactúan dos átomos y solo uno de ellos aporta el par electrónico de la unión. En la formación de compuestos de coordinación se requiere que el átomo donador tenga un par de electrones libres en un orbital exterior; mientras tanto el átomo receptor debe tener orbitales desocupados en su última capa de valencia, donde pueda recibir los electrones “transferidos”.

En este contexto, la química de los compuestos de coordinación queda gobernada por interacciones entre orbitales moleculares *s* y *p* de los átomos del ligando y orbitales *s*, *p* y *d* (para el átomo metálico de la primera serie de transición) ó *s*, *p* y *f* (para el átomo de un

metal de la serie de transición interna). En conjunto, los orbitales *s*, *p* y *d* pueden acomodar hasta 18 electrones y los orbitales *s*, *p* y *f*, pueden albergar hasta 32 electrones.

Vale la pena aclarar, sin embargo, que la formación de compuestos de coordinación no es un fenómeno limitado a átomos de elementos que poseen electrones de valencia en orbitales *d* ó *f*; también se presenta en átomos representativos. Dos ejemplos muy dicentes de este comportamiento son el magnesio (en la clorofila) y el aluminio (en el ion Keggin).

Pero, en términos de la “transferencia” de electrones, el concepto queda ilustrado al visualizar, en términos de estructuras de Lewis, la reacción del amoniac con unión de hidrógeno para formar el ion NH_4^+ . El nitrógeno del amoniac aporta el par libre de electrones al hidrogenión y de esta manera se forma el enlace covalente:

Figura 3. Formación del ion NH_4^+ en términos de estructuras de Lewis.



1.2 Teoría de la hibridización

La hibridización de orbitales es un mecanismo que implica la combinación de los orbitales atómicos puros externos, *s*, *p* ó *d*, a fin de obtener orbitales atómicos híbridos con diferentes formas y orientaciones. De acuerdo con la teoría de hibridización de Pauling, en el momento de combinarse, los átomos alcanzan un estado de excitación, como consecuencia de la energía que ganan; en tal estado, algunos electrones saltan de un orbital inferior a uno inmediatamente superior, provocando una recombinación de éstos y la formación de un conjunto nuevo de orbitales atómicos híbridos.

Básicamente, el modelo de hibridización se resume en las siguientes ideas:

- Un orbital híbrido resulta de la combinación de orbitales atómicos puros.

- El número de orbitales híbridos que se forman es igual al número de orbitales atómicos que se combinan.
- Los orbitales híbridos formados tienen la misma forma y una determinada orientación espacial: sp lineal; sp^2 triangular plana y sp^3 tetraédrica.
- Los orbitales híbridos disponen de una zona o lóbulo enlazante y otra zona o lóbulo antienlazante; el enlace se produce por el solapamiento del lóbulo enlazante con el otro orbital del átomo a enlazar.

En los compuestos complejos formados por metales de transición, la hibridización se da entre los orbitales d , que tienen el número cuántico principal una unidad menor que el de la capa de valencia, y los orbitales s y p . La hibridización es posible debido a que el orbital d interno tiene aproximadamente la misma energía que los orbitales s y p de la capa de valencia. A partir de orbitales puros heterogéneos s , p y d , se obtienen orbitales híbridos homogéneos denominados por ejemplo, sp , sp^2 , sp^3 , spd , sp^2d , sp^3d^2 , entre otros.

1.3 Iones metálicos

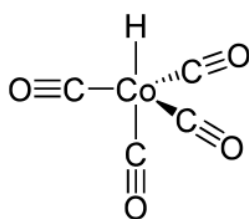
En esencia, uniones un átomo o grupos de átomos que han perdido o ganado electrones y por lo tanto quedan cargados eléctricamente. De esta manera, cuando un metal pierde electrones se convierte en un ion metálico; por ejemplo Fe^{2+} , Fe^{3+} , Ni^{2+} , Mn^{1+} ; en sentido contrario, un ion metálico puede ganar electrones y convertirse en una especie neutra.

Precisamente, utilizando este comportamiento, Humphry Davy logró separar metales, a partir de sus compuestos, aplicando el paso de corriente eléctrica. Michel Faraday, denominó electrólisis a este fenómeno de separación o ruptura; dedujo que la corriente eléctrica conducida en una disolución, obedece al movimiento entre los electrodos de partículas cargadas; tales partículas las denominó iones, que en griego significa "viajero"; además, llamó ánodo al electrodo positivo, región hacia la cual se dirigen las especies negativas, llamadas aniones; el electrodo negativo es el cátodo y atrae los iones con carga positiva o cationes.

1.4 Ligandos

Los ligandos son iones o moléculas que se comportan como bases de Lewis; es decir, ceden electrones a un átomo central, generalmente un metal, para formar compuestos de coordinación. Forman enlaces covalentes en la medida en que el ligando aporta el par de electrones del enlace; de esta manera el ligando queda coordinado al átomo central. Por ejemplo, el hidruro tetracarbonilo de cobalto es un complejo de cobalto con cinco grupos carbonilo que actúan como ligandos.

Figura 4. Hidruro tetracarbonilo de cobalto.

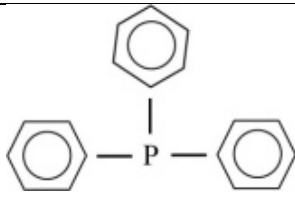



1.4.1 Ligandos monodentados

Los ligandos monodentados son aquellos átomos o moléculas que forman un solo enlace con el átomo central en los compuestos de coordinación; es decir, ocupan una única posición en la esfera de coordinación del metal. En la tabla 1 se relacionan algunos ligandos monodentados.

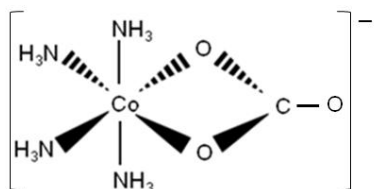
En los compuestos de coordinación pueden encontrarse iones negativos o moléculas neutras como ligandos monodentados. Como ejemplo de iones negativos que ocupan un solo valor de coordinación se encuentran F⁻, Cl⁻, Br⁻, CN⁻, OH⁻, NO₃⁻, NO₂⁻, entre otros. Ciertas moléculas neutras forman compuestos de coordinación actuando como ligandos monodentados; entre ellas se conoce H₂O, NH₃, CO, N₂, PH₃, entre otras.

Tabla 1: Ligandos monodentados.

Nombre del ligando	Fórmula	Nombre del ligando	Fórmula
Aquo	H ₂ O	Carbonil	CO
Hidroxo	OH ⁻	Nitrosil	NO
Amino	NH ₃	Fosfina	PH ₃
Amido	NH ₂	Trifenil	
Fluoro	F ⁻		
Cloro	Cl ⁻		
Oxo	O ²⁺	Piridina	
Peroxo	O ₂ ²⁺		

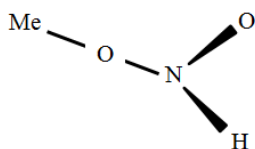
Existen iones con carga mayor a la unidad que se comportan como ligandos monodentados frente a átomos centrales diferentes; tal es el caso de SO₄²⁻, CO₃²⁻ y (C₂O₄)²⁻; en estas situaciones el ion se denomina grupo y el complejo se califica como polinuclear. Estos iones se coordinan frecuentemente como ligandos bidentados, tal como sucede en el compuesto carbonato tetraammincobalto(III), [Co(NH₃)₄CO₃]⁻, donde el ion carbonato ocupa dos posiciones de coordinación.

Figura 5. Carbonato tetraammincobalto(III).

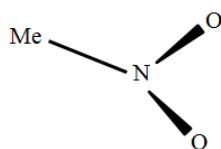


Un ligando también puede unirse al ion central por dos átomos diferentes; a estas especies se les denomina ligandos ambidentados. Por ejemplo el ion nitro, NO₂⁻, si se une al ion metálico a través del nitrógeno se denomina ligando nitro; mientras que si se une por el átomo de oxígeno se denomina nitrito.

Figura 6. Ejemplo de ligando ambidentado.



Ligando nitrito



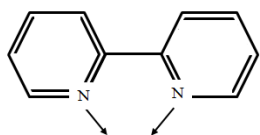
Ligando nitro

Otros ejemplos de iones ambidentados son los iones nitrito, ONO^- , tiocianato, (SCN^-) e isotiocianato, (NSC^-) .

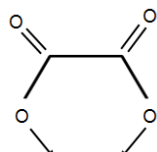
1.4.2 Ligandos polidentados

Los ligandos polidentados son especies capaces de coordinarse por más de una posición con el átomo central; así pueden ser ligandos bidentados, tridentados, en general polidentados. Poseen varios grupos funcionales a través de los cuales pueden ocupar simultáneamente varias posiciones en la esfera de coordinación del mismo átomo central. La etilendiamina, la bipyridina, el ion oxalato y el ion carbonato son algunos ligandos bidentados simétricos comunes.

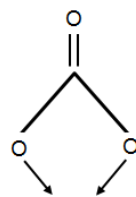
Figura 7. Ligandos bidentados comunes.



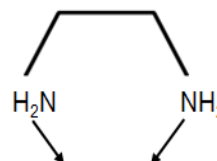
Bipiridina



Ion oxalato



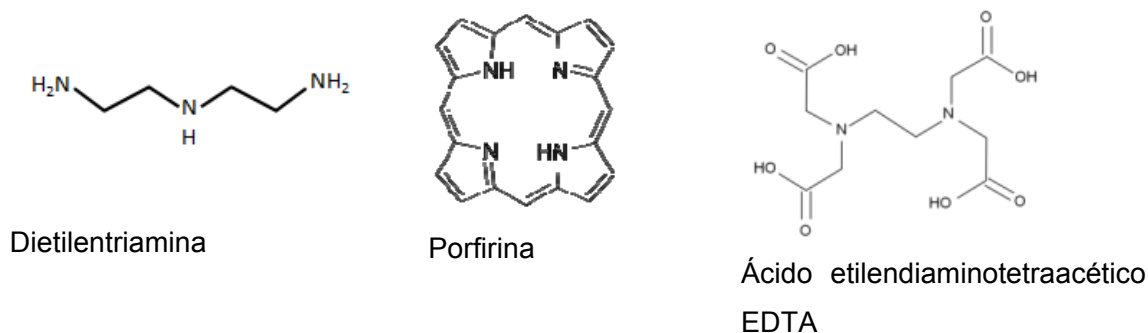
Ion carbonato



Etiléndiamina

La dietilentriammina es un ligando tridentado, las porfirinas son ligandos tetradentados; el ácido etilendiaminotetraacético o EDTA es un ligando hexadentado por cuanto puede formar cuatro enlaces acetato reversibles a través de los grupos carboxilo y dos enlaces a través de los grupos amino.

Figura 8. Ligandos polidentados típicos.

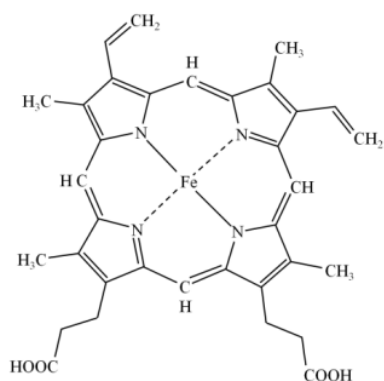


1.5 Quelatos.

Los quelatos son complejos formados por dos o más ligandos polidentados coordinados con un ion metálico central; tal comportamiento resulta en la formación de un anillo heterocíclico. La estabilidad de los quelatos varía con el metal, los ligandos y el número de anillos formados, pero siempre tienen más estabilidad que un complejo formado por ligandos monodentados.

Algunos ligandos que participan en la formación de quelatos son el ácido etilendiaminotetraacético, las porfirinas, el ácido tripolifosfórico, el ácido cítrico, el ácido tartárico y el ácido láctico. El grupo hemo de la hemoglobina es un quelato formado por un anillo de porfirina con un ion central de hierro.

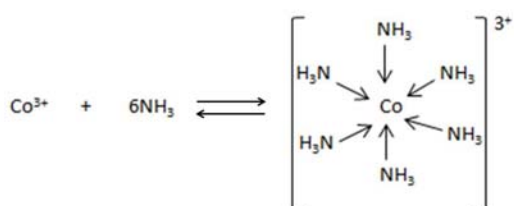
Figura 9. Grupo hemo de la hemoglobina.



1.6 Iones complejos

Los iones complejos se forman por la unión de iones sencillos con moléculas u otros iones de tal forma que la especie queda con carga positiva o adquiere carga negativa; un ejemplo típico lo constituye la formación de los iones amonio ($H^+ + NH_3 \rightarrow NH_4^+$) e hidronio ($H^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+$). El ion complejo hexaminocobalto(III) se forma por la unión del ion Co^{3+} , con seis moléculas de amoniaco.

Figura 10. Formación del ion complejo hexaminocobalto(III).



1.7 Compuestos de coordinación neutros

Al realizar la suma algebraica de los estados de oxidación del átomo central y de los ligandos, se obtiene el número de oxidación del complejo; si las cargas se anulan el complejo será un compuesto neutro, tal como ocurre con las entidades triamíntrinitrocromo(III), $[Cr(NO_2)_3(NH_3)_3]$ y diaminodiclorocobre(II), $[CuCl_2(NH_3)_2]$.

2. Desarrollo epistemológico de los compuestos de coordinación

No es posible establecer cuándo fue descubierto el primer complejo metálico, por cuanto los primeros que se conocieron correspondían a estructuras naturales, de origen mineral, llamativos quizás por sus colores. Tal parece que en 1704, el pintor Heinrich Diesbach y Johann Conrad Dippel (1673–1734), cuando intentaban producir colorantes rojos, obtuvieron el azul de Prusia, $\text{KCN}\cdot\text{Fe}(\text{CN})_2\cdot\text{Fe}(\text{CN})_3$, un compuesto de coordinación de hierro y cianuro (CN^-).

En 1798, Jean Joseph François Tassaert (1765–1835), descendiente de una familia de pintores, registró el hallazgo del $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$. En 1827, luego de someter a reflujo un poco de tetracloruro de platino y potasio con etanol, William Christopher Zeise (1789–1847) logró aislar unos cristales amarillos que posteriormente (1950) se estableció corresponden al compuesto $\text{K}[\text{PtCl}_3(\text{C}_2\text{H}_4)]$. La denominada sal verde de Magnus, $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$, se preparó en el laboratorio hacia 1834. Hacia 1863, Albert Reinecke informó sobre la síntesis de un compuesto de cromo con estructura $[\text{Cr}(\text{NCS})_4(\text{NH}_3)_2]\text{NH}_4$, de color oscuro, denominado “sal de Reinecke”. En la segunda mitad del siglo XIX se anunció la preparación de la sal de Erdmann, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_2(\text{NO}_2)_4]\text{NH}_4$.

Históricamente los compuestos de coordinación, llamaron la atención por su presentación a manera de cristales brillantes y coloridos y, por la modificación de la reactividad de los iones metálicos; sin embargo los estudios de la composición, la estructura, la naturaleza y la relación de los compuestos de coordinación con sustancias más sencillas, solo comenzaron hasta después de 1850. Inicialmente y debido a que estos compuestos parecían estar formados por asociación de sustancias más sencillas, se los rotuló como “compuestos moleculares”, con el fin de diferenciarlos de los “compuestos atómicos”; *v. gr.* PtCl_2 (atómico) y $\text{PtCl}_2\cdot 2\text{NH}_3$ (molecular); posteriormente, se acuñó el término “complejos”, para diferenciarlos de los compuestos simples, teniendo en cuenta que

resultaba muy difícil asignar estructuras que pudieran explicar las propiedades de tales sustancias y que por supuesto, el número de entidades de coordinación conocidas crecía en la medida en que avanzaban las investigaciones.

El desarrollo de modelos para explicar la naturaleza de los compuestos de coordinación tuvo un fuerte apoyo en la ley de las proporciones definidas, que se formuló a partir de las observaciones que Joseph-Louis Proust (1754–1826) había realizado entre 1794 y 1804. Proust estudió la composición del carbonatos de cobre, del óxido de estaño y del sulfuro de hierro, encontrando que la proporción másica de cada uno de los componentes, *v. gr.* carbono, cobre y oxígeno en el carbonatos de cobre, es constante en el compuesto final, en forma independiente de las condiciones de obtención.

Una vez resuelto el asunto de la estequiometría (proporciones), se abordó el problema de la forma en que los átomos se unen para formar compuestos. En 1813, Jöns Jacob von Berzelius (1779–1848), propuso e hizo aceptar un sistema de notación de compuestos químicos (fórmulas) en la cual los elementos se denotan con símbolos simples y las proporciones se señalan con números. En 1827, el mismo Berzelius introdujo el término “isomería”, un vocablo que parecía estar destinado describir la estructura de los compuestos.

Hacia 1853, Charles Frédéric Gerhardt (1816–1856) mostró los resultados de una serie de trabajos realizados entre 1843 y 1846, que le condujeron a reformar la notación de las fórmulas químicas. Con base en estos resultados, Charles Adolphe Wurtz (1817–1884) y August Wilhelm von Hofmann (1818–1892), formularon la “teoría del amonio” como una primera aproximación para explicar la forma en que los átomos están enlazados en los compuestos de coordinación que contienen amoniaco.

En 1852, Edward Frankland (1825–1899) desarrolló una propuesta denominada “teoría de la capacidad de combinación” o “teoría de la atomicidad”, en lo que se considera una primera formulación del concepto de “número de coordinación”, como un anexo a la ley de las proporciones definidas, de tal forma que en un compuesto cada átomo sólo puede unirse a un número fijo de otros átomos. En 1858, Friedrich August Kekulé von Stradonitz

(1829–1896) planteó la idea de que muchos compuestos derivados del carbono tienen que ser producto de la unión de átomos de carbono entre sí, a manera de cadenas.

Los planteamientos de Kekulé y el conocimiento acumulado sobre los compuestos de coordinación llevaron, en 1869, a que Christian Wilhelm Blomstrand (1826–1897) y Sophus Mads Jørgensen (1837–1914) propusieran la denominada “teoría de las cadenas” para explicar la estructura de los compuestos de coordinación. A pesar de que el modelo resultó incorrecto, Blomstrand y Jørgensen se incluyen dentro del grupo de los experimentadores más sobresalientes de la química de los compuestos de coordinación.

En 1893, Alfred Werner (1866–1919) enunció la teoría de las “valencias residuales”, hoy conocida como teoría de la coordinación, según la cual los componentes moleculares inorgánicos (metales o iones metálicos) actúan como un núcleo central al cual se enlaza directamente un número definido de otros átomos (o iones), grupos atómicos o moléculas (neutras o iónicas), para configurar un patrón geométrico (poliedro o polígono) simple. En este contexto un compuesto de coordinación como $\text{CoCl}_3 \cdot 6\text{NH}_3$, debe formularse correctamente como $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+} 3\text{Cl}^-$. Para explicar la estructura de los compuestos de coordinación Werner propuso que los átomos pueden exhibir simultáneamente más de un número de coordinación.

El tercer postulado de Werner sugiere la presencia de isomería óptica en ciertos compuestos de coordinación cuya organización espacial se ajusta a un poliedro octaédrico, como una consecuencia de la asimetría molecular. Esta idea fue refutada por algunos químicos orgánicos, quienes sostenían que la actividad óptica se debía a la presencia de átomos de carbono, con cuatro sustituyentes distintos y que esta propiedad era exclusiva del carbono. En 1914 el grupo de trabajo de Werner sintetizó un compuesto de coordinación sin carbono, el $[\text{Co}(\text{Co}(\text{NH}_3)_4)_3(\text{OH})_6]$, denominado hexol, que presentó actividad óptica. Esta situación no solo consolidó la teoría de la coordinación de Werner sino que además permitió demostrar que la actividad óptica es una consecuencia de la isomería óptica, vista como una función de los elementos y operaciones de simetría de una molécula y no específicamente de un solo tipo de átomo. En 1913, la Real Academia de Ciencias de Suecia otorgó el Premio Nobel de Química a Alfred Werner, “en reconocimiento a su trabajo sobre el enlace de los átomos en las moléculas por lo que ha

arrojado nueva luz sobre las investigaciones anteriores y ha abierto nuevos campos de investigación especialmente en química inorgánica”.

Los estudios estereoquímicos de las moléculas avanzaron con los trabajos de Gilbert Newton Lewis (1875–1946) y Nevil Vincent Sidgwick (1873–1952), quienes hicieron importantes aportes a la teoría del enlace químico. En 1916, Lewis concibió la idea de que un enlace covalente consiste en la compartición de un par electrónico; surgió entonces un modelo, llamado estructuras de Lewis, para explicar la naturaleza del enlace químico, en una molécula, en función de los electrones ubicados en los niveles más externos de los átomos. En 1917, Lewis formuló la regla del octeto como una tendencia que tienen los iones de algunos elementos para completar 8 electrones en sus niveles de energía más externos, de tal forma que adquieren una configuración semejante a la de los átomos de los elementos del grupo 18 (gases nobles).

Con respecto a los compuestos de coordinación, Lewis planteó que “los grupos que se unen al ion metálico, para formar la entidad de coordinación, poseen pares libres de electrones; es decir, que no están compartidos en un enlace”; por ende, definió el número de coordinación como “el número real de pares de electrones que están unidos al átomo metálico”. En 1923, Lewis desarrolló el concepto de acidez–basicidad a la luz de la teoría del par electrónico; así, en un compuesto de coordinación, el ion metálico central es un ácido de Lewis y los grupos (ligandos) que están unidos al ion metálico son bases de Lewis.

Por su parte, Sidgwick explicó la unión en los compuestos de coordinación a través de lo que él llamó “enlace dativo” y demostró la existencia e importancia del “enlace de hidrógeno”; en 1927, propuso la teoría del “efecto del par inerte” para explicar la estabilidad, en estados de oxidación más bajos que el máximo, de elementos del bloque p; este hecho, junto con el modelo de Lewis, revolucionó la química ya que permitió explicar, de manera sencilla, la naturaleza del enlace químico en compuestos diversos, llegando inclusive a visualizar la química de los compuestos de coordinación como reacciones ácido–base.

Hacia 1926, los institutos de física teórica de la Universidad de Munich Ludwig Maximilian, bajo la dirección de Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868–1951), de la Universidad de Göttingen Georg August, bajo el liderazgo de Max Born (1882–1970) y, de la Universidad de Copenhague, bajo la dirección de Niels Henrik David Bohr (1865–1962), formaron un consorcio para, entre otras cosas, trabajar en la disolución de problemas relacionados con la estructura atómica y molecular. Hacia 1927 Walter Heitler (1904–1981) propuso que era posible utilizar el formulismo desarrollado en 1925 por Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887–1961) para demostrar que las funciones de onda de dos átomos de hidrógeno pueden unirse para formar un enlace covalente; junto con Fritz Wolfgang London (1900–1954), Heitler propuso la teoría del enlace de valencia (TEV), un modelo que por primera vez permitió, con base en las consideraciones de la teoría cuántica, estimar las propiedades del enlace en la molécula H_2 .

El conocimiento de la estructura electrónica de las moléculas recibió otro gran aporte en 1927 con el trabajo de Robert Sanderson Mulliken (1886–1996) y Friedrich Hermann Hund (1896–1997), que se cristalizó en el método denominado “teoría de los orbitales moleculares” (TOM); según esta teoría cuando se forman enlaces, los electrones de los átomos amplían sus funciones de onda orbital para expandir su influencia al conjunto de la molécula de la que hacen parte.

Para describir la estructura electrónica de ciertos compuestos de metales de transición que podían ser considerados entidades de coordinación, Hans Albrecht Bethe (1906–2005) y John Hasbrouck van Vleck (1899–1980), propusieron en 1930 un modelo teórico que se llamó “teoría del campo cristalino” (TCC). Aunque no explica las causas de la unión, se encontró que esta teoría puede justificar, a través de “diagramas de separación de campo cristalino”, algunas propiedades como el magnetismo, el color y la entalpía de hidratación de los compuestos de coordinación.

En 1939, Pauling publicó el libro “The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: An introduction to modern structural chemistry”, en el cual desarrolló la teoría del enlace de valencia e introdujo los conceptos de hibridación de funciones de onda orbital y de electronegatividad.

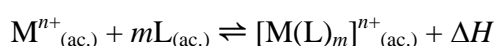
En la década de 1930 a 1940 y como una alternativa a la teoría del campo cristalino, se completó un nuevo modelo, para interpretar la estructura y propiedades de los compuestos de coordinación, basado en las interacciones electrostáticas entre los electrones de los ligandos y los electrones de los orbitales *d* del metal, denominado “teoría del campo de los ligantes” (TCL); esta teoría en cierto modo es una mezcla entre la teoría de orbitales moleculares y la teoría del campo cristalino.

Para completar el panorama del estudio de las entidades de coordinación, hay que agregar que en 1940, en una conferencia dictada por Nevil Vincent Sidgwick y Herbert Marcus Powell (1906–1991) se demostró la existencia de una correlación entre la geometría molecular (alrededor de un átomo central) y los electrones de valencia de los átomos que forman la molécula; con las ideas de esta exposición, en 1957, Ronald James Gillespie (1924–) y Ronald Sydney Nyholm (1917–1971) presentaron un desarrollo denominado “teoría de repulsión de pares electrónicos de la capa de valencia” (VSEPR), situación que permitió explicar la estructura molecular de numerosos compuestos, incluidos los compuestos de coordinación.

3. Formación de compuestos de coordinación y constantes de estabilidad

Un sistema se encuentra en equilibrio, cuando la sumatoria de todas las fuerzas que influyen es cero, es decir los vectores de campo están balanceados; esta situación lleva a conformar un equilibrio estático. No obstante, en los sistemas se presentan reacciones y se forman productos que se separan a manera de nuevos reactivos. El equilibrio se alcanza cuando la velocidad de formación de productos es igual a la velocidad de formación de reactivos.

En un sistema físico en disolución (reactor, tubo de ensayo, vial), la interacción entre una especie atómica (*v. gr.* un ion metálico) y un ligando neutro para formar una entidad de coordinación (con carga positiva) puede interpretarse a través de la siguiente ecuación termodinámica:



Si la energía de Gibbs del proceso es negativa, esto es, si $\Delta G < 0$, entonces la formación del compuesto de coordinación es espontánea; luego, tendrá lugar en forma natural. En este mismo sentido, la ecuación también indica que el proceso es reversible en alguna medida, con lo cual, en función de las cantidades de sustancias de partida (reaccionantes), la producción del compuesto de coordinación (producto), en condiciones isotérmicas, evoluciona hasta alcanzar una composición de equilibrio; en consecuencia, la formación de entidades de coordinación es un proceso gobernado por las leyes del equilibrio químico.

Con observancia a la ley de acción de masas, formulada en 1867 por Cato Maximilian Guldberg (1836–1902) y Peter Waage (1833–1900), que encuentra justificación

termodinámica al examinar el grado de avance de la reacción en la medida en que se acerca al equilibrio; es decir, cuando $\Delta G = 0$, se sigue que la constante de equilibrio (K_e) para la formación del compuesto de coordinación, tiene la siguiente expresión:

$$K_e = \frac{[M(L)_m^{n+}]}{[M^{n+}][L]^m}$$

Los símbolos [] significan concentración molar para disoluciones diluidas. A condiciones estándar termodinámicas (298,15 °K y 1 bar), la constante de equilibrio está relacionada con la variación de la energía de Gibbs a través de la siguiente relación:

$$K_e = e^{-\frac{\Delta G^\circ}{RT}}$$

En la cual R es la constante universal de los gases (8,314 J mol⁻¹ K⁻¹) y T es la temperatura absoluta. Esta expresión puede ponerse en la forma,

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_e$$

En numerosos casos prácticos, relacionados con síntesis de compuestos de coordinación, análisis químico, separación de sustancias, identificación de iones y ligandos, medición de propiedades y otras aplicaciones, resulta de especial interés la estabilidad de las entidades de coordinación. Por tal motivo, en lugar de constante de equilibrio (K_e) se prefiere hablar de constante de estabilidad (β) en la medida en que esta característica, además de la concentración y la temperatura, admite la inclusión de ciertas variables como el pH, la fuerza iónica y la presencia de otros ligandos. En la Tabla 2 se muestran las constantes de formación (estabilidad) de algunos compuestos de coordinación.

Para efectos de comparación, en forma rápida y eficiente, las constantes de estabilidad de las entidades de coordinación se suelen poner en forma de "log K_e ". Lógicamente, un mayor valor de log K_e significa que el compuesto bajo consideración es más estable.

Si bien la termodinámica, a través de ΔG , determina la posibilidad de síntesis de un compuesto de coordinación, es la cinética la que establece la rapidez con que ocurre tal formación. En efecto, la cinética química establece la velocidad de la reacción, las etapas (mecanismos) a través de las cuales ocurre transformación y los factores que afectan el proceso.

Tabla 2. Constantes de formación de algunos compuestos de coordinación en condiciones termodinámicas estándar.

Entidad	K_e	$\log K_e$	Entidad	K_e	$\log K_e$
$[\text{Ag}(\text{CN})_2]^-$	$5,6 \times 10^{18}$	18,7	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$	$1,0 \times 10^{42}$	42,0
$[\text{Ag}(\text{EDTA})]^{3-}$	$2,1 \times 10^7$	7,3	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$	$1,0 \times 10^{37}$	37,0
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	$1,6 \times 10^7$	7,2	$[\text{Fe}(\text{EDTA})]^-$	$1,7 \times 10^{24}$	24,2
$[\text{Al}(\text{EDTA})]^-$	$1,3 \times 10^{16}$	16,1	$[\text{Fe}(\text{EDTA})]^{2-}$	$2,1 \times 10^{14}$	14,3
$[\text{Al}(\text{OH})_4]^-$	$1,1 \times 10^{33}$	33,0	$[\text{Fe}(\text{SCN})]^{2+}$	$8,9 \times 10^2$	2,9
$[\text{Cd}(\text{CN})_4]^{2-}$	$6,0 \times 10^{18}$	18,8	$[\text{Hg}(\text{CN})_4]^{2-}$	$3,0 \times 10^{41}$	41,5
$[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	$1,3 \times 10^7$	7,1	$[\text{Hg}(\text{EDTA})]^{2-}$	$6,3 \times 10^{21}$	21,8
$[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	$2,6 \times 10^5$	5,4	$[\text{Hg}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	$1,8 \times 10^{19}$	19,3
$[\text{Co}(\text{EDTA})]^-$	$1,0 \times 10^{36}$	36,0	$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$	$2,0 \times 10^{31}$	31,3
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	$1,3 \times 10^5$	5,1	$[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	$5,5 \times 10^8$	8,7
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	$4,6 \times 10^{33}$	33,7	$[\text{Ni}(\text{EDTA})]^{2-}$	$3,6 \times 10^{18}$	18,6
$[\text{Co}(\text{EDTA})]^{2-}$	$2,0 \times 10^{16}$	16,3	$[\text{Pb}(\text{EDTA})]^{2-}$	$2,0 \times 10^{18}$	18,3
$[\text{Cr}(\text{EDTA})]^-$	$1,0 \times 10^{23}$	23,0	$[\text{Pb}(\text{OH})_3]^-$	$3,8 \times 10^{14}$	14,6
$[\text{Cr}(\text{OH})_4]^-$	$8,0 \times 10^{29}$	29,9	$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	$2,0 \times 10^{35}$	35,3
$[\text{Cu}(\text{CN})_2]^-$	$1,0 \times 10^{16}$	16,0	$[\text{PtCl}_4]^{2-}$	$1,0 \times 10^{16}$	16,0
$[\text{Cu}(\text{CN})_4]^{2-}$	$1,0 \times 10^{25}$	25,0	$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$	$1,0 \times 10^{18}$	18,0
$[\text{Cu}(\text{CN})_4]^{3-}$	$2,0 \times 10^{30}$	30,3	$[\text{Zn}(\text{EDTA})]^{2-}$	$3,0 \times 10^{16}$	16,5
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	$1,1 \times 10^{13}$	13,0	$[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	$7,8 \times 10^8$	8,9
$[\text{Cu}(\text{EDTA})]^{2-}$	$5,0 \times 10^{18}$	18,7	$[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$	$4,6 \times 10^{17}$	17,7

3.1 Factores que afectan la estabilidad del complejo

La estabilidad de un complejo se ve afectada por factores estructurales que dependen del ion central y de los tipos de ligandos, lo cual se manifiesta en la entalpía de la reacción de formación.

En orden de significancia, las variables que afectan la velocidad de reacción son la concentración de la especie que actúa como núcleo de coordinación (metal, ion metálico), la concentración del ligando, la temperatura, el pH, la fuerza iónica, la presencia de catalizadores y la existencia de otros ligandos en el medio.

También deben considerarse los efectos entrópicos, especialmente en reacciones donde participan ligandos polidentados. No obstante, experimentalmente resulta muy difícil identificar y diferenciar estos factores.

4. Geometría de los compuestos de coordinación


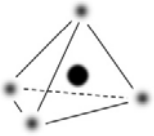
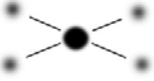
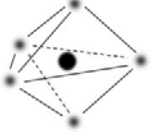


Se conoce como esfera primaria de coordinación en un complejo al número de ligandos que se encuentran unidos directamente al ion metálico central; aunque este número puede estar entre dos y nueve, los valores más comunes en los metales de transición son 2, 4 ó 6, dependiendo del tamaño (del núcleo de coordinación y del ligando), de la configuración electrónica del átomo metálico y de la carga. Los electrones de la capa de valencia se hibridizan dando origen a nuevos orbitales y permitiendo así diferentes motivos geométricos.

La geometría del complejo se ve modificada por el número de coordinación, pero un ion metálico puede tener más de un número de coordinación según el tipo de ligando; esta situación origina así mismo diferentes geometrías. Los núcleos centrales grandes y ligandos pequeños permiten números de coordinación altos; grupos centrales pequeños y ligandos grandes tienden a mostrar números de coordinación pequeños.

La teoría de repulsión de pares de electrones de valencia (RPECV) propone que la disposición geométrica de los ligandos alrededor del átomo central está determinada por la disposición que proporciona menor energía entre los enlaces metal – ligando; los ligandos se ubican lo más lejos posible entre sí y del átomo central, de tal forma que la repulsión estérica se minimice. En función de la naturaleza del núcleo de coordinación, los distintos números de coordinación producen diferentes arreglos estructurales, que consisten en poliedros con las especies donadoras ubicadas en los vértices.

En la Tabla 3 se muestra una compilación de algunos arreglos espaciales que son posibles en compuestos de coordinación sencillos, con ligandos monodentados, en función del número de coordinación.

Tabla 3. Arreglos espaciales de algunos compuestos de coordinación asociados al número de coordinación.

N° de coordinación	Geometría	Tipo de hibridización	Ejemplos
2	 Lineal	sp	$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]$ $[\text{Cu}(\text{CN})_2]^-$
4	 Tetraédrica	sp^3	$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2+}$ $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$
4	 Plano cuadrada	dsp^2	$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ $[\text{Cu}(\text{OH}_2)_4]^{2+}$ $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$
5	 Bipirámide trigonal	dsp^3	$[\text{Fe}(\text{CO})_5]^{3+}$ $[\text{CuCl}_5]^{3-}$
5	 Piramidal cuadrada	d^2sp^2	$[\text{Ni}(\text{CN})_5]^{3-}$ $[\text{MnCl}_5]^{3-}$
6	 Octaédrica	d^2sp^3	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ $[\text{Fe}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$

4.1 Isomería de las entidades de coordinación

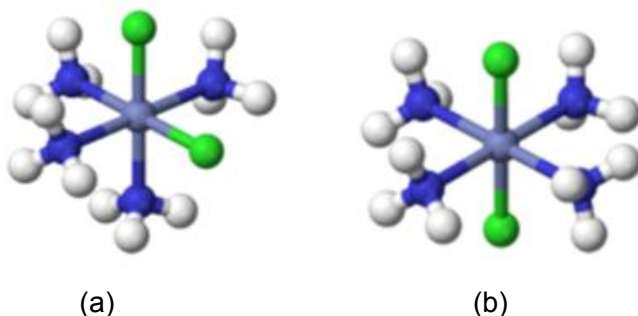
La isomería es una propiedad que hace referencia a dos o más compuestos que poseen idéntica fórmula molecular (el mismo tipo y número de átomos) pero diferente fórmula

estructural (los átomos están organizados espacialmente de forma diferente). La disposición estructural de los compuestos de coordinación puede dar origen a más de una organización espacial con energías similares; por ello, la entidad de coordinación puede adoptar más de una estructura molecular, en forma parecida a los compuestos que poseen átomos de carbono con cuatro sustituyentes diferentes (carbono asimétrico). Con atención a su respectiva clasificación, las entidades de coordinación pueden presentar estereoisomería (geométrica y óptica) e isomería estructural (de enlace y de esfera de coordinación).

4.1.1 Estereoisomería de entidades de coordinación

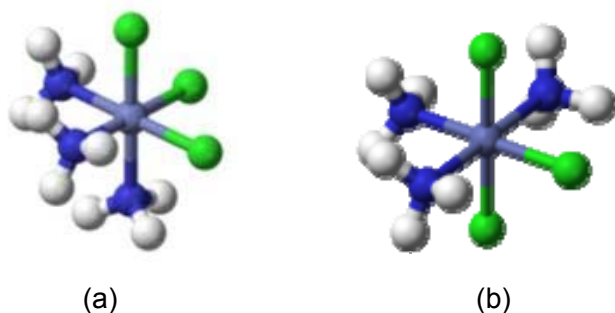
La estereoisomería se produce cuando los compuestos, llamados isómeros, tienen el mismo tipo y número de átomos y de enlaces, pero presentan diferente organización espacial. El isómero “*cis*” es aquel que tiene dos ligandos unidos del mismo lado; el isómero “*trans*” es aquel que tiene dos ligandos opuestos. En la Figura 3, se ilustran los isómeros *cis* y *trans* del $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$.

Figura 11. Ilustración estereográfica del isómero (a) *cis* y (b) *trans* del $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$.



Fuente: Tomado de [http://commons.wikimedia.org/wiki/File: Cis- dichlorotetraammine cobalt\(III\).png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Cis-dichlorotetraamminecobalt(III).png). Mayo 01 de 2012. 10:08 a.m.

El isómero “*fac*” (facial) se produce cuando en un compuesto de coordinación de geometría octaédrica, que además tiene tres ligandos idénticos, los ligandos se ubican de tal forma que ocupan una cara del octaedro. El isómero “*mer*” (meridional) se obtiene cuando los tres ligandos se disponen en el mismo plano del núcleo de coordinación.

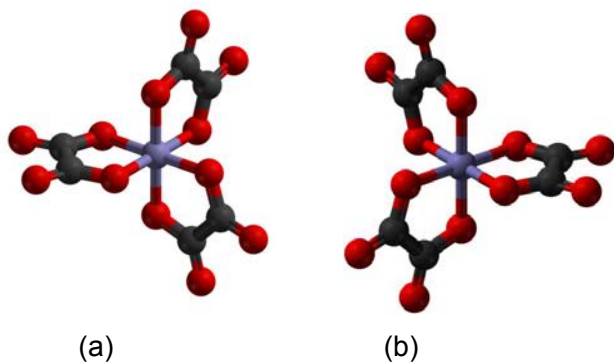
Figura 12. Ilustración estereográfica de los isómeros *fac* (a) y *mer* (b) del $[\text{CoCl}_3(\text{NH}_3)_3]$.

Fuente: Tomado de [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fac-trichlorotriammine_cobalt\(III\).png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fac-trichlorotriammine_cobalt(III).png). Mayo 01 de 2012. 10:12 a.m.

4.1.2 Isomería óptica de entidades de coordinación

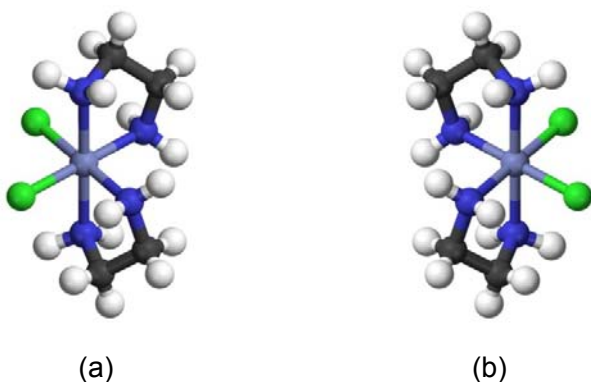
En los compuestos de coordinación, la denominada isomería óptica se presenta cuando la imagen de un compuesto, que se refleja en un espejo plano, no es superponible con el modelo del compuesto original; esto ocurre, *v. gr.* con ligandos bidentados, cuando los enlaces núcleo de coordinación–ligando tienen orientaciones diferentes con lo cual, tomado el núcleo de coordinación como punto de simetría, no se generan planos.

Los isómeros ópticos se clasifican como “*lambda*” (Λ) cuando hacen variar el plano de vibración de la luz polarizada en sentido positivo (contrario a las manecillas del reloj mecánico) ó “*delta*” (Δ) en sentido negativo (en sentido de las manecillas del reloj mecánico), en un determinado ángulo. Un ejemplo lo constituye la entidad de coordinación $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$, de geometría octaédrica. En la Figura 4 se ilustra un modelo del *lambda*-tris(oxalato)ferrate(III), $\Lambda-[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ (isómero que parece describir una hélice hacia la izquierda), frente a su imagen de espejo, y el *delta*-tris(oxalato)ferrate(III), $\Delta-[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ (isómero que parece describir una hélice hacia la derecha).

Figura 13. Isómeros ópticos, (a) Λ y (b) Δ , del $[\text{Fe}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]^{3-}$ 

Fuente: Tomado de [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lambda-tris\(oxalato\)ferrate\(III\)-3D-balls.png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lambda-tris(oxalato)ferrate(III)-3D-balls.png). Mayo 01 de 2012. 10:43 a.m.

En algunos compuestos de coordinación es posible la coexistencia de las isomerías geométrica y óptica, tal como ocurre con el *cis*-diclorobis(etilendiamino)cobalto(III), *cis*- $[\text{CoCl}_2(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{-CH}_2\text{NH}_2)_2]^+$.

Figura 14. Isómeros ópticos, (a) Λ y (b) Δ , del *cis*- $[\text{CoCl}_2(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{-CH}_2\text{NH}_2)_2]^+$.

Fuente: Tomado de [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lambda-cis-dichlorobis\(ethylenediamine\)cobalt\(III\).png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Lambda-cis-dichlorobis(ethylenediamine)cobalt(III).png). Mayo 01 de 2012. 10:51 a.m.

4.1.3 Isomería estructural y de esfera de coordinación

La isomería estructural en entidades de coordinación se da cuando el número y el tipo de átomos son iguales, pero los enlaces son diferentes entre sí. La isomería de enlace se produce cuando un mismo ligando se une por medio de átomos distintos al núcleo de coordinación; esto se da con los ligandos ambidentados pero también podría ocurrir con ligandos polidentados.

La isomería de esfera de coordinación se produce cuando una entidad de coordinación discrimina el tipo y número de ligandos que acceden a su esfera de coordinación y deja otros por fuera de ella. Así por ejemplo, las siguientes sales son isómeros de esfera de coordinación: $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$ (violeta), $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_5\text{Cl}]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (verde), y $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_4\text{Cl}_2]\text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (verde).

5. Teorías de formación de complejos

Desde el descubrimiento de los complejos como entidades químicas propiamente dichas, la teoría de coordinación de Werner fue el punto de partida para explicar la existencia de estos compuestos. A partir de postulados basados en el concepto de la existencia de dos tipos de valencia, la teoría de Werner explica parcialmente la existencia y las propiedades generales, así como la estereoquímica de las entidades de coordinación.

Como resultado de trabajos posteriores, se han afinado las observaciones y se han propuesto varios modelos teóricos para explicar la existencia de los complejos, tales modelos son la teoría del campo cristalino (TCC), la teoría del enlace de valencia (TEV), la teoría de los orbitales moleculares (TOM), la teoría del campo de ligando (TCL) y la teoría de repulsión de pares de la capa de valencia (VPSR).

5.1 Teoría del campo cristalino (TCC)

Fue creada hacia 1930 por los físicos estadounidenses Hans Bethe y John Hasbrouck van Vleck. Sus investigaciones se realizaron sobre el estudio de la estructura octaédrica de los complejos por tratarse de la conformación más común entre los metales de transición.

Básicamente esta teoría enfoca su atención sobre la disposición espacial de los orbitales d del ion metálico central en su interacción con los ligandos que se consideran cargas puntuales negativas. Al acercarse los ligandos más hacia unos orbitales d que hacia otros, la distribución del campo se hace asimétrica, por lo cual unos orbitales (d_{xy} , d_{zx} , d_{yz} , d_z^2 ó $d_{x^2-y^2}$), aumentan su energía mientras que otros la disminuyen; esta interacción se conoce como campo cristalino y la diferenciación en la energía de los orbitales explica entre otras propiedades, el color de los compuestos de coordinación.

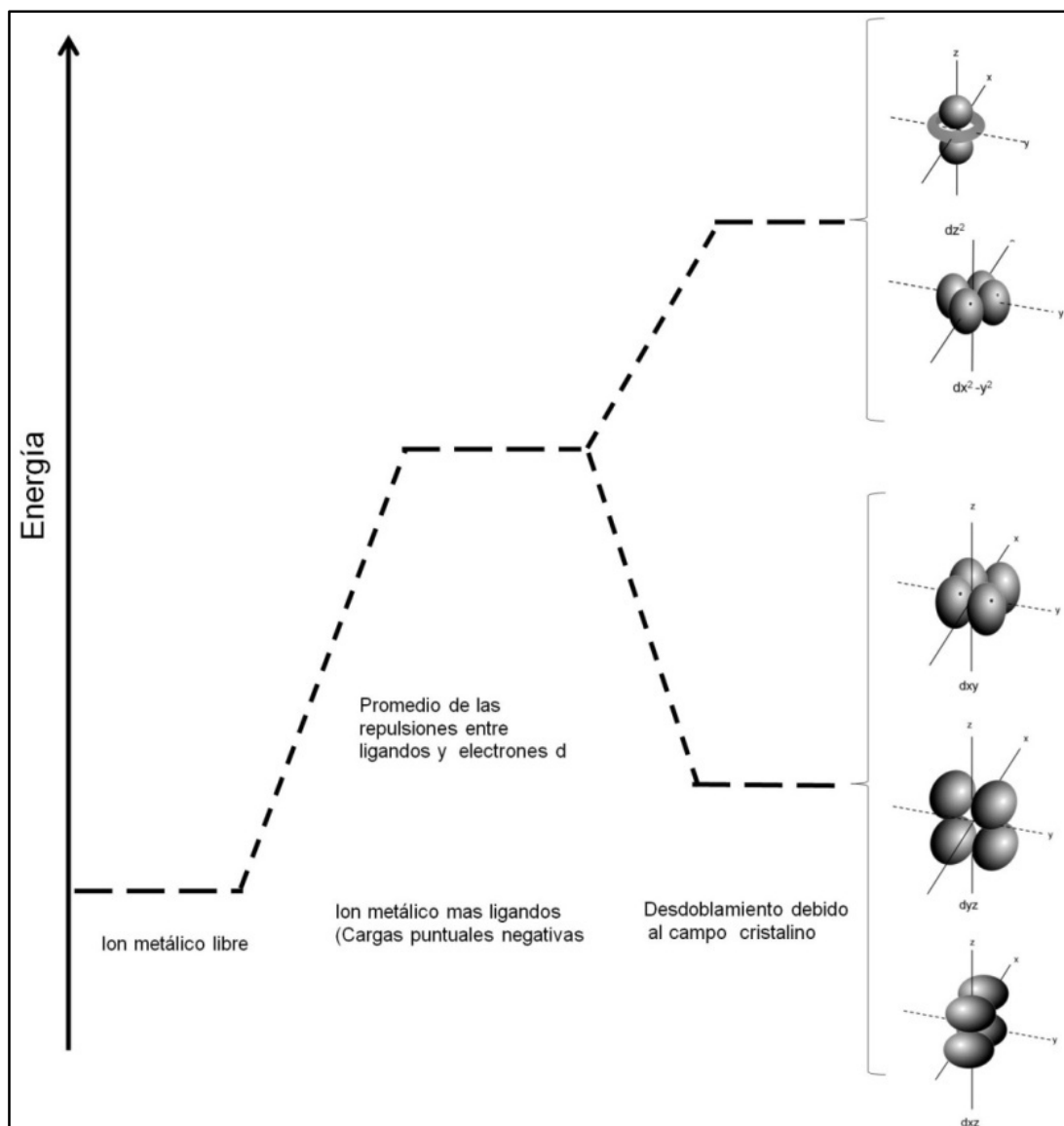
Los cinco orbitales d del metal en su estado nativo, denominados orbitales degenerados y que poseen una carga uniforme, se separan en dos grupos de energía distinta por efecto del campo generado por los ligandos. Se observa que los orbitales d_z^2 y $d_{x^2-y^2}$ aumentan su energía, mientras los orbitales d_{xy} , d_{xz} y d_{yz} la disminuyen. La diferencia de energía entre los dos grupos se conoce como energía de desdoblamiento cristalino, Δ . Los orbitales d_z^2 y $d_{x^2-y^2}$ se agrupan como e_g de mayor energía y los d_{xy} , d_{xz} y d_{yz} se agrupan como t_{2g} de menor energía. La magnitud de la separación entre el grupo de orbitales e_g y el grupo de orbitales t_{2g} depende de la capacidad que tengan los ligandos para separar los orbitales d . La figura 2 muestra un diagrama de descomposición de orbitales d .

Según este modelo (TCC) las transiciones electrónicas entre los orbitales d deformados, de distinta energía, son las responsables del color en los compuestos de coordinación; a mayor fuerza del ligando, habrá mayor separación; la transición será más energética, la longitud de onda será menor y el color irá en la dirección rojo, anaranjado, amarillo, verde, azul y violeta.

Los ligandos se clasifican de acuerdo con su capacidad para aumentar la diferencia de energía, Δ , conocida como serie espectroquímica. La denominada “serie espectroquímica” organiza los ligandos, de manera empírica, según la fuerza con que deforman los orbitales d ; así, la orden de separación es el siguiente: $I^- < Br^- < S^{2-} < SCN^- < Cl^- < NO_3^- < N^3- < F^- < OH^- < C_2O_4^{2-} < H_2O < NCS^- < CH_3CN < py < NH_3 < en < bipy < phen < NO_2^- < PPh_3 < CN^- < CO$.

La presencia de electrones en situación de espín apareado o desapareado, explica el comportamiento magnético de estas sustancias. En algunos casos la energía de la separación entre e_g y t_{2g} es mayor que la denominada “energía de apareamiento” de electrones en un orbital d normal; en otros casos, la “energía de la separación” es menor que la “energía de apareamiento”. En el primer escenario, se obtiene una entidad denominada “compuesto de coordinación de bajo espín”; en el segundo, se obtiene una entidad llamada “compuesto de coordinación de alto espín”.

Figura 15. Diagrama de separación de energía en un complejo de estructura octaédrica.



5.2 Teoría del enlace de valencia

En forma primaria, la teoría del enlace de valencia (TEV) se puede apreciar como una consecuencia del modelo de las estructuras de Lewis, en las cuales únicamente se tienen en cuenta los electrones presentes en los orbitales más externos de los átomos (electrones de valencia); sin embargo, la idea central es que es factible combinar

funciones orbitales atómicas, siguiendo los métodos del álgebra lineal, para formar funciones orbitales híbridas, de igual energía (energéticamente degeneradas), con una orientación espacial determinada. La formación del enlace ocurre por solapamiento o traslapamiento de funciones orbitales atómicas de los átomos participantes de los ligandos y funciones orbitales híbridas del núcleo de coordinación.

5.3 Teoría de orbitales moleculares (OM).

La teoría de los orbitales moleculares (TOM) surge como complemento a la teoría del enlace de valencia. Considera que los electrones alojados en los orbitales externos de los átomos que forman una molécula, se mezclan formando nuevos orbitales que se distribuyen alrededor de toda la molécula. Estos electrones se conocen como electrones deslocalizados.

Los orbitales atómicos se solapan liberando energía a medida que los electrones son atraídos por los núcleos; este hecho puede resumirse en que la energía de los orbitales moleculares es menor a la suma de la energía de los orbitales atómicos que lo forman. Mientras mayor es el solapamiento, el orbital molecular tendrá menor energía; el proceso de acercamiento se estabiliza a una distancia determinada conocida como distancia de enlace.

Los orbitales moleculares reciben nombres como sigma (σ), pi (π) y se dividen en enlazantes y antienlazantes; además son susceptibles de organizar en orden creciente de energía. De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli y la regla de Hund, los electrones de la molécula se asignan comenzando por los orbitales de menor energía. Los orbitales moleculares son más estables cuando se forman a partir de orbitales atómicos de energías similares; por ejemplo orbitales s-s; sin embargo, resulta difícil describir la geometría de los compuestos de coordinación, predecir la reactividad química, explicar las propiedades magnéticas, justificar el color y sustentar las propiedades eléctricas.

En esencia, la teoría de los orbitales moleculares usa la combinación lineal de funciones de onda de orbitales atómicos (LCAO) para formar funciones de onda de orbitales

híbridos. Sin embargo, cuando se forma el compuesto de coordinación, desaparecen las funciones de onda “orbitales atómicos” y en su lugar surgen funciones de onda “orbitales moleculares” (LCAO–MO); esto es, que incluyen dos o más núcleos atómicos. La teoría establece además que la combinación lineal produce tantos orbitales moleculares como orbitales atómicos haya para formarlos; en la Tabla 4, se ilustran estas posibilidades.

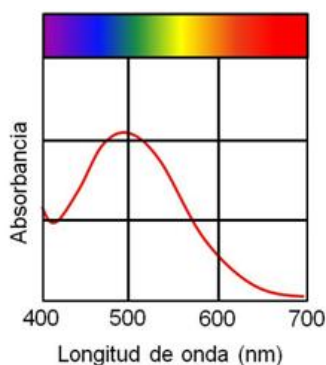
Tabla 4. Funciones de onda “orbitales híbridos”, obtenidos por combinación lineal de funciones de onda de “orbitales atómicos” de valencia.

Orbitales <i>s</i>	Orbitales <i>d</i>	Orbitales <i>p</i>	LCAO–MO	Hibridación
1		1	2	sp
1		2	3	sp^2
1		3	4	sp^3
1	1	1	3	spd
1	1	2	4	sp^2d
1	1	3	5	sp^3d
1	2	1	4	spd^2
1	2	2	5	sp^2d^2
1	2	3	6	sp^3d^2
1	3	1	5	spd^3
1	3	2	6	sp^2d^3
1	3	3	7	sp^3d^3
1	4	1	5	sp^2d^4
1	4	2	6	sp^2d^4
1	4	3	7	sp^3d^4
1	5	1	7	spd^5
1	5	2	8	sp^2d^5
1	5	3	9	sp^3d^5

5.4 Teoría del campo ligando (TCL).

A luz de la teoría del campo de ligandos, los colores intensos y vistosos de los compuestos de coordinación están determinados por la diferencia de energía (Δ) que existe entre el conjunto de los orbitales e_g y el conjunto de los orbitales t_{2g} ; cuando la luz blanca incide sobre la entidad de coordinación (sólida ó en disolución), la especie absorbe radiación y los electrones saltan del nivel t_{2g} al nivel e_g ; entonces los electrones regresan al nivel t_{2g} y emiten fotones visibles. Tal es el caso del compuesto $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{OCl})_3^+$, de color púrpura; la absorción de energía corresponde a las radiaciones verde y amarillo; los fotones desprendidos son rojo, azul y violeta, cuya mezcla da púrpura.

Figura 16. Espectro de absorción del $[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]_3^+$.



En esta situación, es factible clasificar la absorción de luz blanca producida por un compuesto de coordinación constituido por un metal (ó ion metálico) y distintos ligandos o por un ligando y diferentes metales. Es más, gracias a la coloración de la entidad de coordinación es posible conocer el estado de oxidación de la especie metálica y hacer inferencias sobre la estructura de los orbitales d o f que participan; inclusive el color puede depender del pH del medio. En la Tabla 5 se muestran algunos casos.

Tabla 5. Formulación y color de algunas entidades de coordinación.

Medio	Entidad de coordinación				
	Fe(III)	Co(II)	Cu(II)	Cr(III)	Al(III)
Ácido	$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$	$[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$	$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$	$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$	$[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$
	Amarillo	Rosado	Azul	Verde	Incoloro
OH^- dil.	$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$	$[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{OH})_2]$	$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{OH})_2]$	$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$	$[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$
	Marrón (↓)	Verde azul (↓)	Azul (↓)	Verde (↓)	Blanco (↓)
NH_3 dil.	$[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$	$[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{OH})_2]$		$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$	$[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_3(\text{OH})_3]$
	Marrón (↓)	Verde azul (↓)	Azul intenso (↓)	Verde (↓)	Blanco (↓)

6. Nomenclatura de los compuestos de coordinación

Debido a que una entidad de coordinación puede formarse entre átomos metálicos neutros ó entre iones metálicos y ligandos neutros ó ligandos cargados, la especie estable puede tener una formulación en la cual, en función de la relación núcleo de coordinación y número de ligandos, resulta un balance neto de carga que puede ser positivo, negativo o cero. El exceso de carga negativa se contrarresta con contraiones positivos (*v. gr.* metales alcalinos ó alcalinotérreos); el exceso de carga positiva se equilibra con contraiones negativos (*v. gr.* haluros, sulfatos, carbonatos, fosfatos, nitratos, nitritos, sulfuros). En cualquier caso, la carga neta de la entidad de coordinación se establece al sumar las cargas del núcleo de coordinación y de los ligandos. Por convención, la entidad de coordinación, que se considera “especie estable” se pone entre paréntesis rectos, con un superíndice que representa la carga neta; un ejemplo lo constituye el ion hexacianocobalto (II), $[\text{Co}(\text{CN})_6]^{4-}$.

La denominada “esfera de coordinación” es una región muy próxima al núcleo de coordinación en la cual es factible que los electrones de los átomos del ligando interactúen con orbitales desocupados de la especie ácido de Lewis; pero, más allá también existen otras esferas de coordinación, que permiten explicar la formación de estructuras más complejas. El “número de coordinación” (N) del núcleo es equivalente al número de pares electrónicos que se transfieren desde el ligando. En general, el valor del número de coordinación depende del tamaño del núcleo y del tamaño del ligando.

Según la IUPAC, para escribir la fórmula un compuesto de coordinación, se deben seguir las siguientes reglas:

- a. La entidad de coordinación se escribe entre paréntesis rectos.

- b. Dentro de los paréntesis rectos se escriben en orden los cationes, los aniones y las especies neutras.
- c. En caso de existir más de una especie con igual carga, se ponen en orden alfabético del átomo que está unido al núcleo de coordinación.
- d. Por fuera de los paréntesis rectos se pone, a manera de superíndice, la carga neta de la entidad de coordinación.

Las recomendaciones de la IUPAC para la nomenclatura de las entidades de coordinación son las siguientes:

- a. Identificar la carga neta del compuesto de coordinación.
- b. Para nombrar la especie de coordinación se citan los ligandos en orden alfabético.
- c. La formulación de los ligandos o su nombre simplificado se escribe entre paréntesis curvos.
- d. Los ligandos aniónicos se mencionan en orden alfabético, según su nombre común (haluro, sulfato, nitrato, fosfato, clorato); sin embargo, existen algunos nombres especiales como oxo (O^{2-}), hidroxilo (HO^-), peroxo (O_2^{2-}), mercapto (HS^-), tio (S^{2-}). Algunos ligandos neutros sencillos toman nombres como amino (NH_3), agua (H_2O), nitrosilo (NO) y carbonilo (CO). Este orden alfabético no tiene en cuenta los índices numéricos que indican varias entidades de un mismo ligando, v. gr. di, tri, tetra, penta y hexa.
- e. Los prefijos di, tri, tetra, penta y hexa, se utilizan para indicar el número de una misma clase de ligando unidentado que se enlaza al núcleo de coordinación. Los prefijos bis, tris, tetraquis, pentaquis y hexaquis, se utilizan para indicar el número de una misma clase de ligando polidentado que se enlaza al núcleo de coordinación.
- f. Los ligandos ambidentados reciben un nombre que depende del átomo que se une al núcleo de coordinación; v. gr. NO_2 , nitrito si se enlaza por el oxígeno o nitro si se une por el nitrógeno; SCN^- , tiocianato si se une por el azufre o isotiocianato se enlaza por el nitrógeno.
- g. Al nombrar la especie central hay que tener en cuenta la carga neta de la especie de coordinación. Si la carga es negativa, se usa una palabra compuesta por la raíz del núcleo (ión metálico), seguida de la terminación "ato" y el estado de oxidación del átomo

central, entre paréntesis y en números romanos. Por ejemplo, $[\text{Fe}(\text{CN})_5(\text{H}_2\text{O})]^{2-}$, acuapentacianoferrato (III).

h. Si la entidad de coordinación tiene carga positiva o neutra, al átomo central no se le adicionan sufijos. v. gr. $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$, tetracarbonilníquel (0).

i. Las sales de los compuestos de coordinación se nombran como cualquier otra sal, teniendo en cuenta el nombre del anión o catión. Por ejemplo: $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, hexacianoferrato (II) de potasio; $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$, sulfato de tetrammincobre(II).

Los siguientes son algunos ejemplos de nombres de compuestos de coordinación, aplicando las reglas de nomenclatura recomendadas por la IUPAC.

$\text{K}_2[\text{Cu}(\text{CN})_4]$	Tetracianocuprato de potasio(II)
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]\text{Cl}$	Cloruro de diaminoplatina
$[\text{Cr}(\text{OH}_2)_6](\text{NO}_3)_3$	Nitrato de hexaacuocromo(III)
$[\text{Co}(\text{en})_2\text{Br}_2]\text{Cl}$	Cloruro de dibromobis(etilendiamina)cobalto(III)
$\text{Na}[\text{Al}(\text{OH})_4]$	Tetrahidroxialuminato de sodio
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4][\text{PtCl}_6]$	Hexacloroplatinato(IV) de tetraaminoplatino(II)

7. Aplicaciones e impacto ambiental de los compuestos de coordinación

Los compuestos de coordinación o complejos son sustancias presentes en la naturaleza y que por demás se producen sintéticamente con múltiples propósitos; su importancia radica en sus aplicaciones teóricas y prácticas. Con ellos se explica el color de numerosas gemas, la preparación de pigmentos cerámicos, la obtención de catalizadores para procesos de polimerización, la manufactura de vidrios coloreados, la galvanoplastia (cobrizado, niquelado, cromado y dorado), la elaboración de espejos, la formulación de ablandadores para productos de limpieza, el tratamiento de intoxicaciones por metales y la significancia de los grupos prostéticos (porción no proteica) en la acción enzimática.

Dentro de los complejos biológicos naturales pueden citarse la hemoglobina encargada del transporte de oxígeno en la sangre, formada por un átomo de hierro unido a anillos de porfirina y la clorofila constituida por iones de magnesio unidos a anillos de porfirina. La vitamina B-12 o cianocobalamina, es un complejo de cobalto.

Los complejos se utilizan para realizar análisis cuantitativos y cualitativos de diversos iones metálicos como el hierro. El agente quelatante EDTA se emplea para determinación de Ca^{2+} y Mg^{2+} en análisis de aguas. El ion dimetilgloximato, DMG, se emplea para hacer determinaciones gravimétricas, tales como Ni^{2+} .

En la industria de detergentes se emplean agentes quelatantes para formar complejos con Ca^{2+} y Mg^{2+} , reduciendo la dureza del agua y mejorando la efectividad del detergente; dada esta propiedad de reaccionar con iones específicos, se les denomina agentes secuestrantes. También se emplean en la industria textil para el blanqueo y teñido de tejidos.

Los compuestos de coordinación también se utilizan para tratar aguas de calderas, aprovechando la propiedad de secuestrar el oxígeno disuelto con lo cual se reduce la oxidación de las instalaciones de acero; también reduce la formación de incrustaciones calcáreas.

Algunos colorantes industriales son complejos de ftalocianinas con metales como cobre, níquel, hierro y cobalto. También se utilizan complejos como catalizadores en diversos procesos industriales como hidrogenación de olefinas, polimerizaciones, isomerizaciones de olefinas, entre otros.

A pesar del alto grado de toxicidad que presentan los metales pesados, sus complejos tienen aplicaciones en medicina para tratamientos de cáncer, artritis y ciertos casos de envenenamiento.

7.1 Impacto ambiental de las entidades de coordinación

Se entiende por impacto ambiental a toda alteración de las condiciones ambientales en sus distintos aspectos, por la acción antrópica o a eventos naturales. Son diversas las acciones humanas que afectan el equilibrio medioambiental; específicamente la utilización de compuestos de coordinación en diversas industrias, como detergentes, agroquímicos y la extracción de metales pesados que provocan modificaciones de las condiciones bióticas y abióticas del entorno natural.

Los detergentes, así como los jabones, están formados básicamente por un compuesto tensoactivo, v. gr., dodecilmencensulfonato de sodio ($C_{12}H_{25}-C_6H_4-SO_3Na$), el cual modifica la tensión superficial del agua; así disminuye la adhesión de las partículas a una superficie y permite su eliminación.

Estos compuestos tensoactivos sintéticos se convierten en contaminantes persistentes por cuanto no se descomponen fácilmente por la acción bacteriana, aunque existe una familia de detergentes blandos de fácil degradación. Debe tenerse en cuenta que estos productos se utilizan en grandes cantidades, cuyos residuos se convierten en contaminantes al ser vertidos en las aguas servidas.

Al alcanzar los efluentes acuosos, estos vertimientos provocan disminución del oxígeno disponible, afectando la vida acuática. Inhiben los procesos de fotosíntesis en la flora acuática y provocan lesiones en las branquias de los peces.

Los denominados metales presentan hoy por hoy concentraciones extremas por la explotación industrial. La materia orgánica reacciona fuertemente con estos elementos formando complejos y quelatos estables; la toxicidad se potencia por la formación de complejos organometálicos, facilitando la dispersión, la solubilidad y la disponibilidad dentro de los organismos o a través del medio. La persistencia de los complejos se debe a la estabilidad que presentan frente a la degradación por acción bacteriana.

El EDTA o ácido etilendiaminotetraacético, se aplica como agente quelatante por sus capacidad para formar complejos solubles con diversos metales pesados. No obstante, la estabilidad misma de los complejos formados, dificulta la degradación biológica de éstos, lo que provoca su acumulación y persistencia. La capacidad del EDTA de reaccionar con iones metálicos le permite movilizarlos y contaminar consecuentemente las aguas superficiales y subterráneas.

8. Propuesta metodológica para la enseñanza de compuestos de coordinación

La enseñanza de la ciencia en general, ha seguido un patrón tradicional de clases magistrales y, en algunos casos, prácticas rutinarias de laboratorio; no obstante, el aprendizaje sigue siendo memorístico y poco significativo.

Antes de entrar a cuestionar el modelo pedagógico implementado, es más importante la determinación de la estrategia de enseñanza, dejando en claro el objetivo que se espera alcanzar. En décadas anteriores era primordial la memorización de información y en ese momento las estrategias de enseñanza se orientaban a lograr que el estudiante memorizara la mayor cantidad de información.

No obstante, siendo la ciencia una construcción humana, todo aprendizaje debe tener significado; un tema tiene significado cuando se puede asociar al propio entorno y el estudiante le encuentra aplicación en la solución de problemas reales. De esta manera, la enseñanza de la ciencia debe seguir un patrón de enseñanza activo, donde el estudiante se sienta protagonista de su propio proceso de aprendizaje.

En este orden de ideas, para introducirse en la enseñanza de los compuestos de coordinación con estudiantes de grado décimo, se hace a través del desarrollo de un taller experimental de aula, diseñado de acuerdo con una metodología activa (Anexo 1).

El manejo de conceptos previos y la experimentación con sustancias propias de la zona, le permiten al estudiante relacionar el concepto de compuestos complejos con las actividades propias de la industria y de esta forma darle significado al conocimiento adquirido.

A. Anexo: Taller experimental de aula

TITULO: Determinación de hierro por la técnica de espectrofotometría en aguas de formación de petróleo

PROFESOR: Erdy Yesid Alfonso

GRADO: Décimo de educación media

INTRODUCCIÓN

El florecimiento de la industria de explotación de hidrocarburos en Aguazul, impactó sensiblemente el entorno económico, social, cultural y ecológico de sus habitantes, obligándolos a modificar hábitos y costumbres por nuevas respuestas frente a las condiciones emergentes.

En este contexto, la escuela debe ofrecer a sus estudiantes un conocimiento amplio y bien estructurado de diversos temas del saber que les permita apreciar la importancia y el uso del conocimiento como herramienta para la generación de riqueza y bienestar social.

A partir de este enfoque, se busca que el estudiante adquiera un nuevo concepto de laboratorio y que además tenga la posibilidad de confrontar los conceptos teóricos adquiridos dentro de las aulas con datos extraídos de la realidad.

OBJETIVO

Desarrollar una práctica de laboratorio, con estudiantes de grado décimo de educación media, para determinar la presencia de hierro en aguas de formación de petróleo, utilizando una técnica de espectrofotometría y teniendo en cuenta la propiedad de los

metales de transición de formar compuestos de coordinación y presentar coloraciones específicas.

CONCEPTOS PREVIOS

Metales pesados. Se conocen como metales pesados aquellos cuya densidad es superior a 5 g/cm^3 ; estos elementos pertenecen al grupo de metales de transición y forman compuestos de coordinación. Algunos metales pesados representativos son cromo (Cr), hierro (Fe), cobre (Cu), níquel (Ni).

Hierro. Es un metal maleable, de color gris plateado, extremadamente duro y pesado, conocido y utilizado desde la antigüedad. Es un metal ferromagnético de símbolo Fe, número atómico 26, peso atómico 55,847, densidad $7,86 \text{ g/cm}^3$ y configuración electrónica $[\text{Ar}] 4s^2 3d^6$.

Es el metal más utilizado, con el 95% en peso de la producción mundial de metales, principalmente en la industria siderúrgica; es utilizado como matriz para alojar otros elementos de aleación, tanto metálicos como no metálicos, para darle propiedades especiales al material.

Enlaces de coordinación. Los enlaces de coordinación se forman cuando solamente uno de los reactantes aporta el par de electrones. En estos casos se requiere que el átomo donador tenga un par de electrones libre en un orbital exterior, mientras el átomo receptor tenga la capacidad de recibirlos en su última capa de valencia. Este fenómeno se da átomos que puedan hibridar los orbitales *s*, *p* y *d*.

Compuestos de coordinación. Un compuesto de coordinación o complejo es aquella sustancia constituida por un átomo central, con orbitales de valencia desocupados, rodeado por iones o moléculas con pares de electrones no compartidos que se transfieren a los orbitales vacíos del átomo central para formar enlaces covalentes coordinados. Es una entidad química bien precisada, con propiedades físicas y químicas bien definidas, diferentes de las del ion metálico y los ligandos que la constituyen.

El átomo central corresponde principalmente a iones metálicos, (aunque puede ser un catión, un átomo neutro e inclusive un anión), los cuales actúan como ácidos de Lewis, rodeados de moléculas o aniones denominados ligandos que aportan pares electrónicos, como bases de Lewis.

Espectrofotometría. La espectrofotometría uv – visible es un método de análisis óptico que permite determinar la concentración de una sustancia en disolución al comparar la radiación absorbida o transmitida por una disolución que contiene una cantidad desconocida de soluto, y una que contiene una cantidad conocida de la misma sustancia. Se emplea la espectrofotometría ultravioleta-visible (UV/VIS) la cual utiliza luz visible, ultravioleta cercana (UV) e infrarroja cercana (NIR) del espectro electromagnético. Se emplea un espectrofotómetro, equipo que permite seleccionar una longitud de onda y dirigirla a través de una disolución; por medio de un detector se determina la cantidad de radiación absorbida, según la concentración del soluto, y este valor se interpola en una curva de calibración.

Curva de calibración. Es la representación gráfica, en un plano cartesiano, de la Concentración (C) en función de la Absorbancia (A). Se preparan varias disoluciones de concentración conocida y se determinan sus A, y con estos datos se construye la curva de calibrado, que es una recta.

PROBLEMA DIDÁCTICO A RESOLVER CON EL EJERCICIO

Durante la enseñanza de la química en el ciclo de educación media, el estudiante encuentra dificultades para realizar prácticas de laboratorio; esta situación conlleva a una desarticulación entre los contenidos teóricos expuestos en las aulas de clase y las situaciones reales que se manejan en las industrias. Este ejercicio le permite al estudiante confrontar sus conceptos teóricos con aplicaciones propias de la industria, al hacer la determinación del ion Fe^{3+} en una muestra de aguas de formación en pozos petroleros.

HABILIDADES, ADEMÁS DE LO CONCEPTUAL, A DESARROLLAR EN EL ESTUDIANTE

Medir, pesar, observar, describir, identificar, comparar, analizar.

PROCEDIMIENTO

Identificación de conceptos previos. El estudiante debe indagar sobre los siguientes conceptos:

- ¿Cómo se determina un metal por espectrofotometría?
- ¿Qué es la fenantrolina?
- ¿Cómo se forma el petróleo?
- ¿Qué son aguas de formación?
- ¿Qué compuestos complejos conoce?

Hipótesis o pregunta para la actividad didáctica.

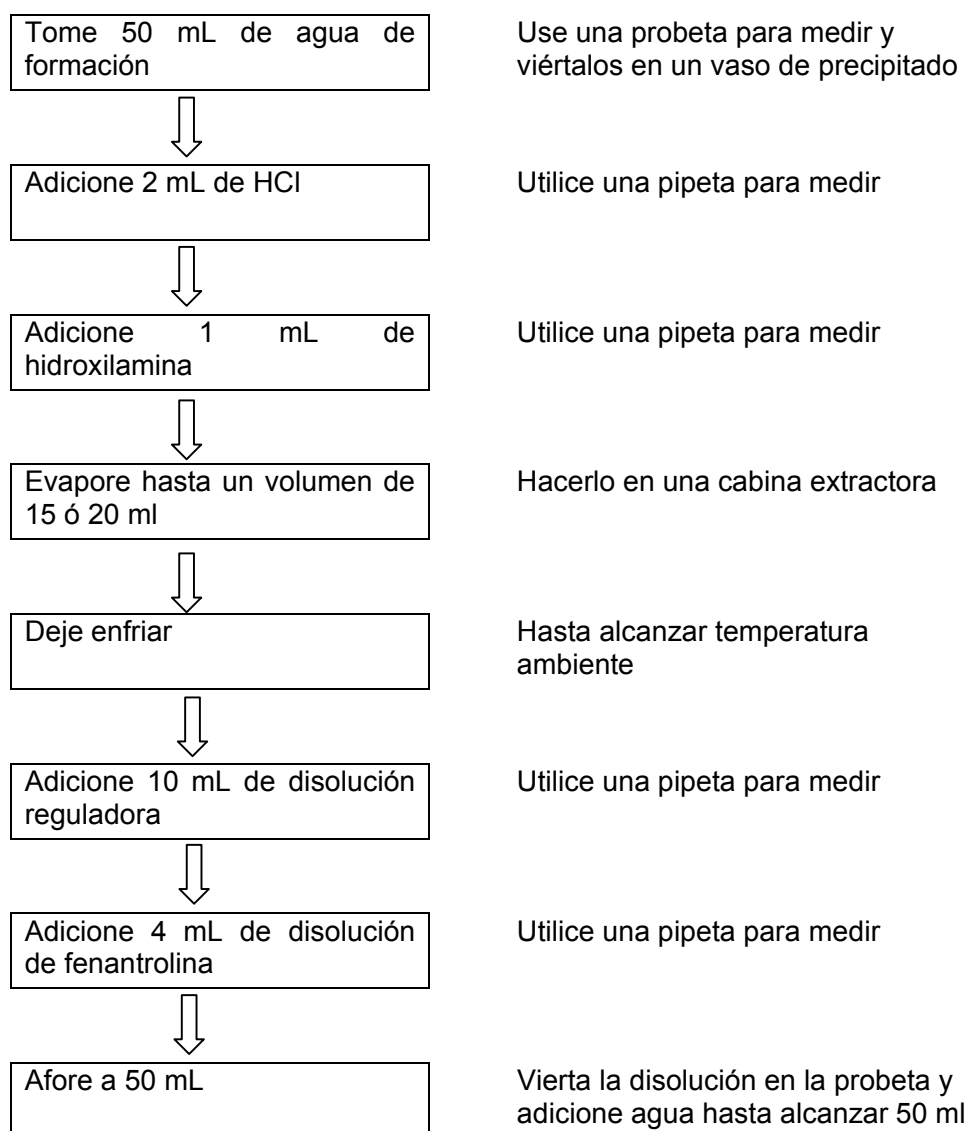
- Las aguas de formación de petróleo provenientes de pozos petroleros de la vereda Cupiagua del municipio de Aguazul, ¿contienen hierro?
- La concentración de hierro en estas aguas de formación, ¿causaría efectos nocivos si alcanzan las fuentes hídricas del municipio de Aguazul?

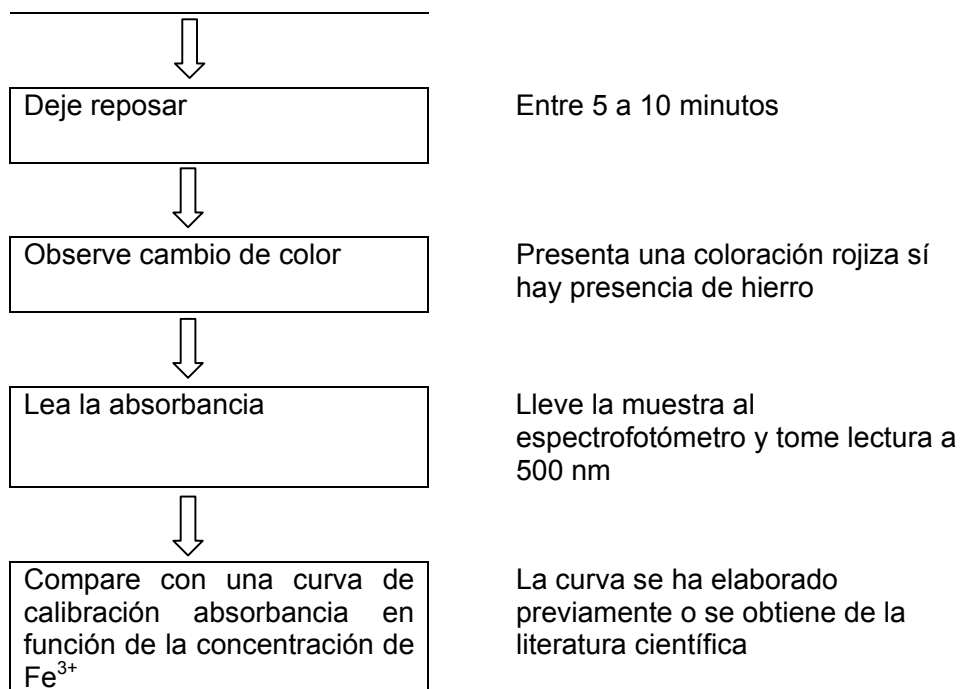
Materiales y reactivos para la actividad didáctica.

- Disolución de fenantrolina al 0,1% en disolución alcohólica
- Disolución buffer, (acetato de aluminio)
- Disolución de ácido clorhídrico al 2%
- Disolución de hidroxilamina al 10%
- Muestra de agua de formación
- Agua destilada
- Espectrofotómetro

- Estufa
- Vaso de precipitado de 100 mL
- Agitador de vidrio
- Pipeta aforada de 50 mL
- Probeta

Protocolo de desarrollo o de toma de datos para la actividad didáctica. Formar ocho grupos de cinco estudiantes; cada grupo debe realizar la práctica completa y entregar un informe por grupo. Para la obtención de los datos se sigue el siguiente procedimiento:





Análisis de resultados de la actividad didáctica. Realice el análisis de los datos encontrados teniendo en cuenta las siguientes preguntas:

- ¿Por qué ocurrió el cambio de color?
- ¿Qué tipo de compuesto se formó?
- ¿Qué tan precisa es la técnica de espectrofotometría para determinar la concentración de un metal?

PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

Los estudiantes deben elaborar un informe que contenga:

- Desarrollo de las preguntas propuestas como “Identificación de conceptos previos”.
- Resultados de la lectura de absorbancia en la muestra que analicen.
- Gráfica de la curva de calibración.
- Determinación de la concentración de Fe^{3+} presente en la muestra, por interpolación en la curva de calibración.

- Desarrollo de las preguntas propuestas para el análisis de resultados de la actividad didáctica.

SOCIALIZACIÓN DE LOS RESULTADOS DEL EJERCICIO

Se realizará una sesión plenaria (seminario) donde un representante de cada grupo presentará los resultados obtenidos; los estudiantes deben presentar sus conclusiones y hacer sus preguntas para aclarar dudas, ampliar y unificar conceptos.

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Para realizar la evaluación se tendrá en cuenta los siguientes aspectos:

- El trabajo y buen comportamiento en el laboratorio
- El desarrollo de las preguntas previas
- La presentación de las conclusiones
- La participación en la sesión plenaria

BIBLIOGRAFÍA UTILIZADA Y RECOMENDADA

BASOLO, FRED Y JOHNSON RONALD. Química de los compuestos de coordinación. Barcelona: Reverté. 1980.

BAUTISTA ZÚÑIGA, FRANCISCO. Introducción a la contaminación del suelo por metales pesados. Yucatán - México: Universidad Autónoma de Yucatán. 1999.

QUÍMICA DE COORDINACIÓN- MODELO DE LEWIS.
http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/ciencias/2000189_1/html/quimica-de-coordinacion-modelo-de-lewis.html.

9. Conclusiones y recomendaciones

9.1 Conclusiones

La enseñanza de la ciencia en general, ha seguido un patrón tradicional de clases magistrales y, en algunos casos, prácticas tradicionales de laboratorio; el esquema general de aprendizaje se traduce en un ejercicio rutinario de transmisión y recepción pasiva de conocimientos elaborados.

Cuando se tiene una amplia experiencia en el ejercicio docente, es fácil caer en el sofisma de que enseñar no requiere una preparación previa de las clases y de una actualización de los conocimientos al ritmo que avanza la ciencia. De esta manera, se cae en la rutina de repetir conceptos no actualizados, sin los adecuados niveles de competencia.

Hacer una aproximación a un tema que normalmente no se enseña en la educación secundaria permite romper esos esquemas tradicionalistas y abordar conceptos más complejos propios de la química.

A pesar que abunda la literatura referente a los compuestos de coordinación, en el aula de clase se hace mención de los enlaces covalentes coordinados; no obstante, el tema no se desarrolla ampliamente aduciendo falta de tiempo o de comprensión por parte de los estudiantes.

Al profundizar sobre los compuestos de coordinación, se encuentra que es un tema de amplia aplicación y fácil relación con los componentes del entorno; los compuestos de coordinación están presentes en todos los sistemas bióticos y abióticos de la naturaleza.

9.2 Recomendaciones

Antes de entrar a cuestionar el modelo pedagógico implementado, es más importante la determinación de la estrategia de enseñanza, dejando en claro el objetivo que se espera alcanzar. En décadas anteriores era primordial la repetición de información y en ese momento las estrategias de enseñanza se orientaban a lograr que el estudiante memorizara la mayor cantidad de información.

No obstante, siendo la ciencia una construcción humana, todo aprendizaje debe tener significado; un tema tiene significado cuando se puede asociar al propio entorno y el estudiante le encuentra aplicación en la disolución de problemas reales. De esta manera, la enseñanza de la ciencia debe seguir un patrón de enseñanza activo, donde el estudiante se sienta protagonista de su propio proceso de aprendizaje.

En este orden de ideas, para introducirse en la enseñanza de los compuestos de coordinación con estudiantes de grado décimo, se hace a través del desarrollo de un taller experimental de aula, diseñado de acuerdo con una metodología activa, como el propuesto en el anexo 1.

El manejo de conceptos previos y la experimentación con sustancias propias de la zona, le permiten al estudiante relacionar el concepto de compuestos complejos con las actividades propias de la industria y de esta forma darle significado al conocimiento adquirido.

Bibliografía

BASOLO, Fred y JOHNSON, Ronald. Química de los compuestos de coordinación. Barcelona: Reverté. 1980. 178 p.

BAUTISTA ZÚÑIGA, Francisco. Introducción a la contaminación del suelo por metales pesados. Yucatán - México: Universidad Autónoma de Yucatán. 1999. Vol. 1.

BROWN, Theodore L., *et al.* Química: la ciencia central. México D.F.: Pearson Education. Novena edición. 2004. 1152 p.

BURRIEL MARTÍ, Fernando, *et al.* Química analítica cualitativa. Madrid: Paraninfo Cengage Learning. 18ª edición. 1988. 1072 p.

CRABTREE, Robert H. y PERIS FAJARNES, Eduardo. Química organometálico de los metales de transición. Castellón de la Plana, España: Universitat Jaume. 1997. 572 p.

DAVIS, Raymond E. y WHITTEN, Kenneth W. Química. México D.F.: Cengage Learning Editores S.A. Octava edición. 2008. 1176 p.

DOUGLAS, Bodie Eugene; Mc DANIEL, D.H. y ALEXANDER John J. Conceptos y modelos de química inorgánica. Barcelona: Reverte. Segunda edición 1994. 777 p.

GUTIÉRREZ RÍOS, Enrique. Química. Barcelona: Reverté S.A. Edición en español. 1985. 500 p.

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TÉCNICAS. Tesis y otros trabajos de grado. Bogotá: Legis, 2007.

KOTZ, Jhon C.; TREICHEL, Paul M y WEAVER, Gabriela C. Química y reactividad química. México D.F.: Impresora Apolo S.A. Sexta edición. 2005. 1292 p.

LARSEN, Edwin M. Elementos de transición. Barcelona, España: Reverté. 1972. 156 p.

MANAHAN, E. Stanley. Introducción a la química ambiental. Barcelona: Reverté. 2007. 725 p.

MINISTERIO DE EDUCACIÓN NACIONAL. Serie lineamientos curriculares: Ciencias Naturales y Educación Ambiental. Bogotá: MEN. 1998.

MOELLER, Therald. Química inorgánica. Barcelona, España: Reverté. 1972. 882 p.

ODETTI, Héctor y NOTTANI, Eduardo. Introducción a la química inorgánica. Santa Fe, Argentina: Universidad Nacional del litoral. Tercera edición corregida. 2006. 420 p.

SHARPE, Alan G. Química inorgánica. Barcelona: Reverté S.A. Segunda edición. 1993. 784 p.

Dirección Nacional de Servicios Académicos Virtuales. Química de coordinación. {En línea}. {Consultado jueves 09 de febrero}. Disponible en: http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/ciencias/2000189_1/html/quimica-de-coordinacion-introduccion.html

Departamento de Programas Audiovisuales. Facultad de Química. UNAM. Ciudad Universitaria. México D.F. Química de los compuestos de coordinación. {En línea}. {Consultado miércoles 21 de marzo}. Disponible en: <http://depa.pquim.unam.mx/amyd/archivero/Complejos-y-su-nomenclatura-13378.pdf>.

Tema 12. Metales de transición. Universidad de Castilla-La Mancha. {En línea}. {Consultado lunes 26 de marzo de 2012}. Disponible en: http://www.uclm.es/profesorado/afantinolo/docencia/inorganica/tema12/Trans_T12IQ.pdf