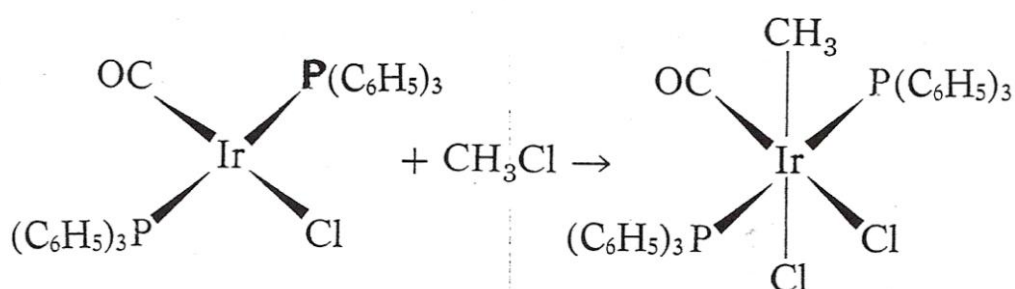


## Estereoisómeros Oh :

- *Distribución de ligandos monodentados*
- *Distribución de anillos quelatos*
- *Coordinación de ligandos asimétricos*

□ *Reacción de adición oxidante:*



8 estereoisómeros : 6 diastereoisómeros (2 de ellos disimétricos)

## Método de Bailar :

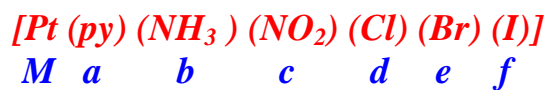


15 diastereoisómeros , cada uno con un enantiómero

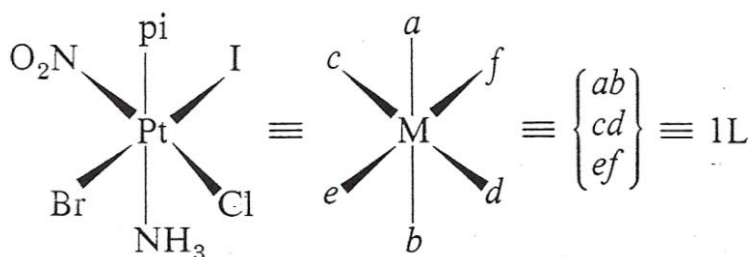
ENUMERACIÓN DE LOS ISÓMEROS POSIBLE  
PARA UN COMPLEJO DEL TIPO  $Mabcdef$

	L	M	N
1	$ab$	$ab$	$ab$
	$cd$	$ce$	$cf$
	$ef$	$df$	$de$
2	$ac$	$ac$	$ac$
	$bd$	$be$	$bf$
	$ef$	$df$	$de$
3	$ad$	$ad$	$ad$
	$bc$	$be$	$bf$
	$ef$	$cf$	$ce$
4	$ae$	$ae$	$ae$
	$bc$	$bd$	$bf$
	$df$	$cf$	$cd$
5	$af$	$af$	$af$
	$bc$	$bd$	$be$
	$de$	$ce$	$cd$

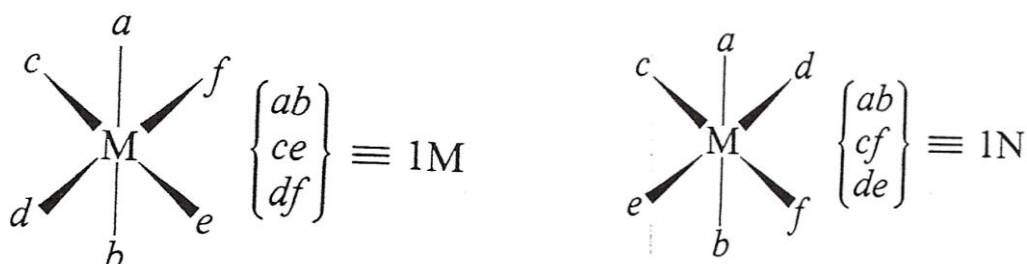
1.- Asignación una letra a cada ligando



2.- Referencia a. Agrupación L trans. Ordenación alfabética



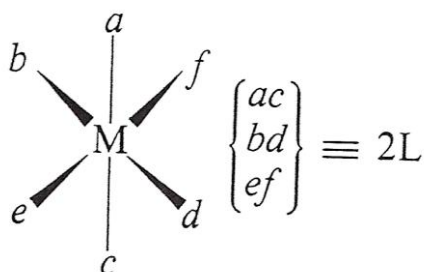
3.- Intercambio L d - e ó d - f manteniendo a y b  $\rightarrow$  2 isómeros



4.- Reemplazar *b* por *c*. Intercambiar *e* – *d* ó *d* - *f* → 3 isómeros

(2ª fila Tabla)

ENUMERACIÓN DE LOS ISÓMEROS POSIBLE PARA UN COMPLEJO DEL TIPO *Mabcdef*



	L	M	N
1	<i>ab</i>	<i>ab</i>	<i>ab</i>
	<i>cd</i>	<i>ce</i>	<i>cf</i>
	<i>ef</i>	<i>df</i>	<i>de</i>
2	<i>ac</i>	<i>ac</i>	<i>ac</i>
	<i>bd</i>	<i>be</i>	<i>bf</i>
	<i>ef</i>	<i>df</i>	<i>de</i>
3	<i>ad</i>	<i>ad</i>	<i>ad</i>
	<i>bc</i>	<i>be</i>	<i>bf</i>
	<i>ef</i>	<i>cf</i>	<i>ce</i>
4	<i>ae</i>	<i>ae</i>	<i>ae</i>
	<i>bc</i>	<i>bd</i>	<i>bf</i>
	<i>df</i>	<i>cf</i>	<i>cd</i>
5	<i>af</i>	<i>af</i>	<i>af</i>
	<i>bc</i>	<i>bd</i>	<i>be</i>
	<i>de</i>	<i>ce</i>	<i>cd</i>

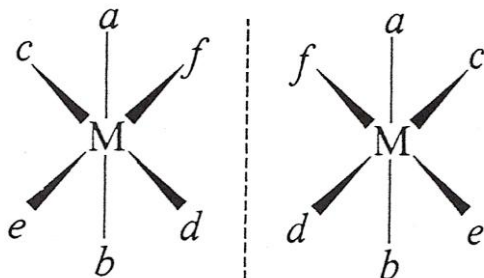
5.- Filas 3ª, 4ª, 5ª → procedimiento similar

Información Tabla → 15 diastereoisómeros

No indicación enantiómeros



análisis particular de diastereosomería



## Complejos con dos pares de ligandos iguales

$$A = b; d = c$$

$$Mabcdef \rightarrow Ma_2c_2ef$$

	L	M	N
1	aa cc ef	aa ce cf	$\begin{bmatrix} aa \\ cf \\ ce \end{bmatrix}$
2	ac ac ef	ac ae cf	ac af ce
3	$\begin{bmatrix} ac \\ ac \\ ef \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} ac \\ ae \\ cf \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} ac \\ af \\ ce \end{bmatrix}$
4	$\begin{bmatrix} ae \\ ac \\ cf \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} ae \\ ac \\ cf \end{bmatrix}$	ae af cc
5	$\begin{bmatrix} af \\ ac \\ ce \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} af \\ ac \\ ce \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} af \\ ae \\ cc \end{bmatrix}$

$$1N; 2L = 3L$$

$$2M = 3M, 4L, 4M$$

$$2N = 3N, 5L, 5M$$

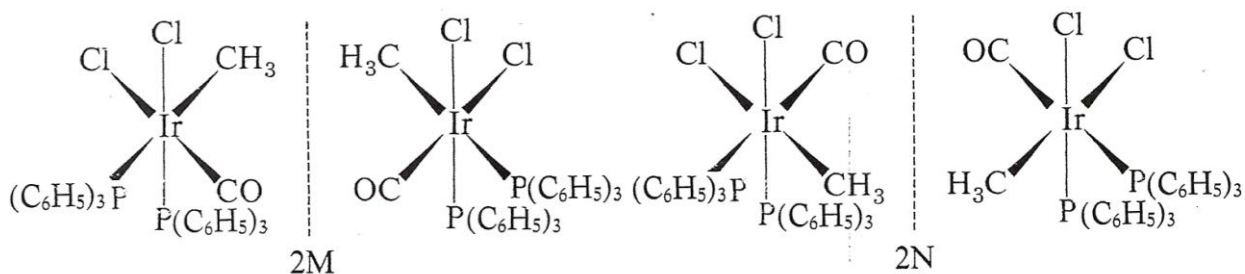
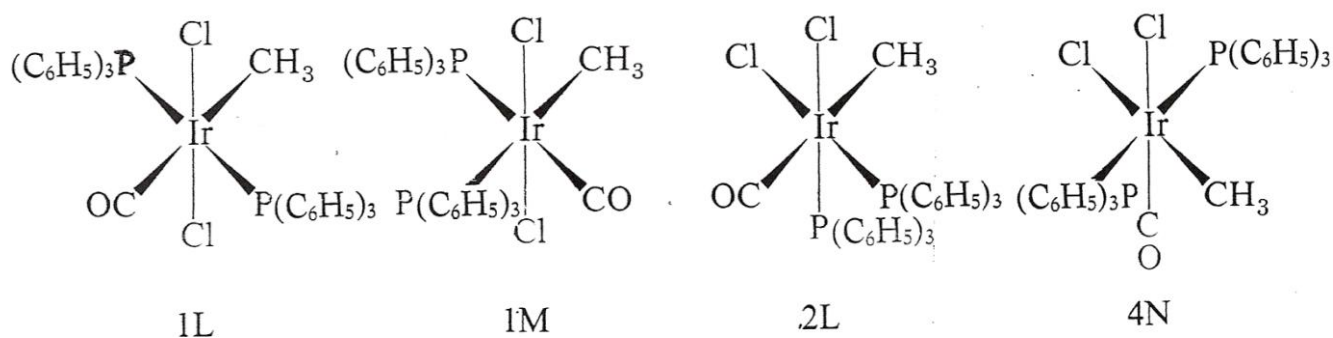
$$= 5N$$

$$1M =$$

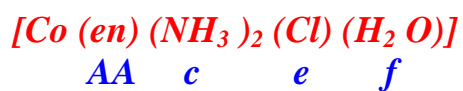
$$4N$$

**[ ] isómeros duplicados**

**6 diastereoisómeros, 2 de ellos disimétricos  $\rightarrow$  enantiómeros**



## Complejos con ligandos quelantes : quelatos



$$a, b = AA ; d = c$$



	L	M	N
1	$\begin{pmatrix} AA \\ cc \\ ef \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AA \\ ce \\ cf \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AA \\ cf \\ ce \end{pmatrix}$
2	Ac Ac ef	Ac Ae cf	Ac Af ce
3	$\begin{bmatrix} Ac \\ Ac \\ ef \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} Ac \\ Ae \\ cf \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} Ac \\ Af \\ ce \end{bmatrix}$
4	$\begin{bmatrix} Ae \\ Ac \\ cf \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} Ae \\ Ac \\ cf \end{bmatrix}$	Ae Af cc
5	$\begin{bmatrix} Af \\ Ac \\ ce \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} Af \\ Ac \\ ce \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} Af \\ Ae \\ cc \end{bmatrix}$

( ) *Eliminación 1ª fila*

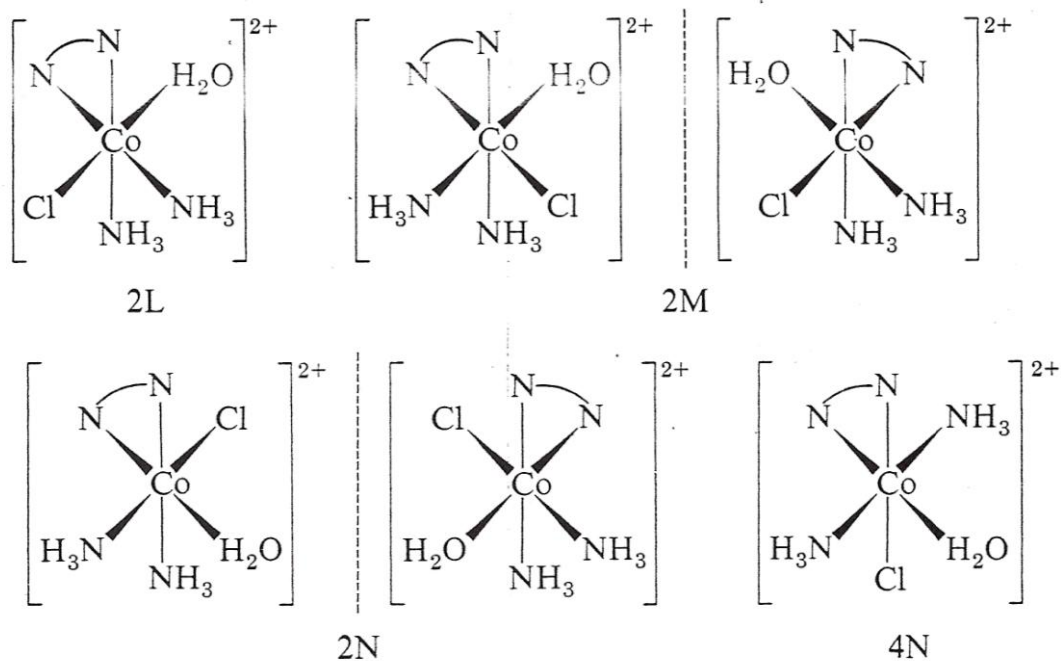
$$2L = 3L$$

$$2M = 3M, 4L, 4M$$

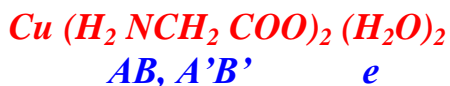
$$2N = 3N, 5L, 5M$$

$$5N = 4N$$

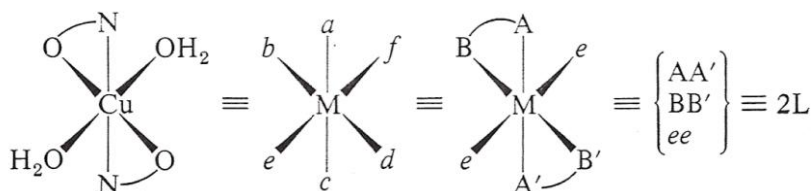
4 diastereoisómeros, 2 de ellos disimétricos  $\rightarrow$  enantiómeros



Complejos con dos ligandos bidentados iguales y asimétricos :



$AB = a, b$   
 $A'B' = c, d$   
 $e = e, f$



	L	M	N
1	$\begin{pmatrix} AB \\ A'B' \\ ee \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AB \\ A'e \\ B'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AB \\ A'e \\ B'e \end{pmatrix}$
2	$\begin{pmatrix} AA' \\ BB' \\ ee \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AA' \\ Be \\ B'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AA' \\ Be \\ B'e \end{pmatrix}$
3	$\begin{pmatrix} AB' \\ BA' \\ ee \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AB' \\ Be \\ A'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} AB' \\ Be \\ A'e \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} Ae \\ BA' \\ B'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} Ae \\ BB' \\ A'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} Ae \\ Be \\ A'B' \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} Ae \\ BA' \\ B'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} Ae \\ BB' \\ A'e \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} Ae \\ Be \\ A'B' \end{pmatrix}$

( ) *Eliminados*

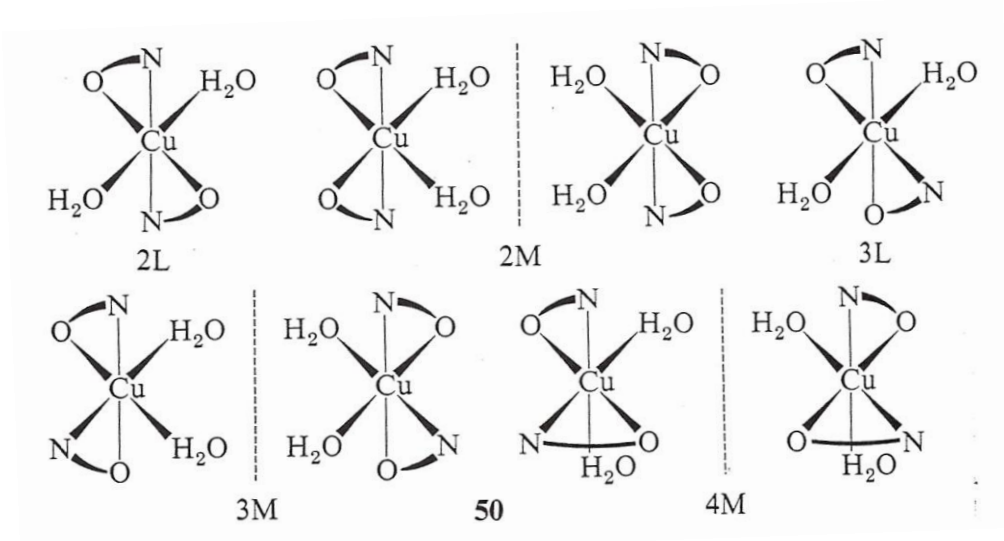
$2M = 2N$

$3M = 4L, 5L$   
 $(A = A', B = B')$

$3M = 3N$

$5M = 5N$

5 diastereoisómeros, 3 de ellos disimétricos → 3 enantiómeros



**Tabla:** *n° de estereoisómeros de algunos complejos Oh con ligandos mono- y polidentados*

Fórmula general	Número total de estereoisómeros	Pares de enantiómeros
$Ma_6$	1	0
$Ma_5f$	1	0
$Ma_4e_2$	2	0
$Ma_3d_3$	2	0
$Ma_4ef$	2	0
$Ma_3def$	5	1
$Ma_2cdef$	15	6
$Mabcdef$	30	15
$Ma_2c_2e_2$	6	1
$Ma_2c_2ef$	8	2
$Ma_3d_2f$	3	0
$M(AA)(BC)ef$	10	5
$M(AB)(AB)ef$	11	5
$M(AB)(CD)ef$	20	10
$M(AB)(AB)(AB)$	4	2
$M(ABA)def$	9	3
$M(ABC)(ABC)$	11	5
$M(ABBA)ef$	7	3
$M(ABCBA)f$	7	3

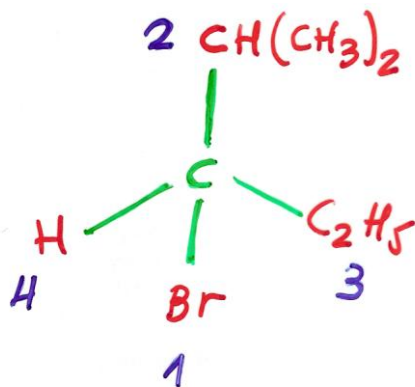
<sup>a</sup> Las letras minúsculas representan ligandos monodentados y las mayúsculas los átomos dadores de los ligandos que forman quelatos.

<sup>b</sup> Tabla recopilada usando las siguientes fuentes: W. E. Bennet, *Inorg. Chem.*, **8**, 1325 (1969); B. A. Kennedy, D. A. McQuarrie, y C. H. Brubaker, *Inorg. Chem.*, **3**, 265 (1964).

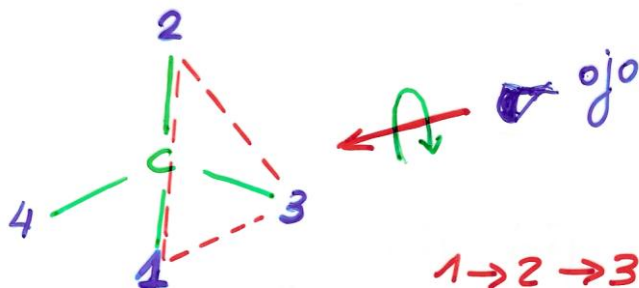
**Nomenclatura: Sistema Cahn – Ingold – Prelog (CIP)**

**Orden de prioridad:**  $1 > 2 > 3 > 4$  ( $n^\circ$  atómico)

**prioridad 1  $\rightarrow$  mayor  $n^\circ$  atómico**



**Estereoquímica del centro quiral: R, S :**



**R:** orden de prioridad  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$  sentido agujas del reloj

**S:** orden de prioridad  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$  sentido contrario a agujas del reloj

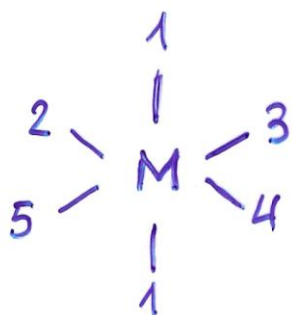
(mirando desde la cara opuesta al átomo con  $n^\circ$  de prioridad más alto)



Chemical Abstract : *conjunto de índices*

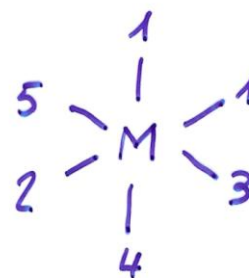
- 1.- Simetría del centro: T-4 (*tetraédrico*)  
 SP-4 (*plano cuadrado*)  
 TB-5 (*bipirámide trigonal*)  
 SP-5 (*pirámide cuadrada*)  
 OC-6 (*octaédrico*)  
 TP-6 (*prisma triangular*)

2.- Índice de configuración: *nº de dos dígitos*



14

1M1 eje principal

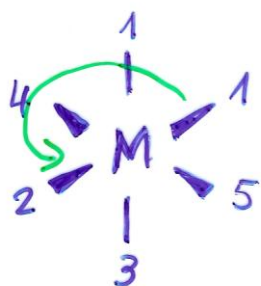


42

1M4 eje principal

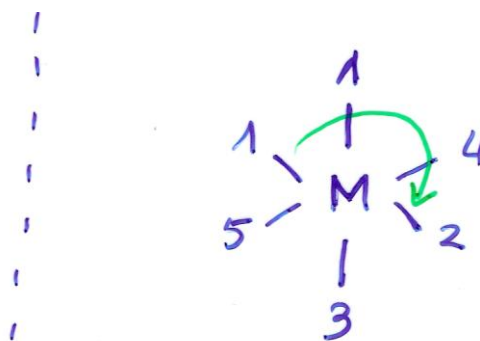
3.- Símbolo de quiralidad : C : *índices prioridad plano ζ eje principal*  
 ↓  
*sentido agujas reloj (mirando desde 1 del eje principal)*

A : *configuración opuesta*



1 → 2 (4 → 5)

quiralidad A



1 → 2 (4 → 5)

quiralidad C