

NOMENCLATURA DE QUÍMICA INORGÁNICA II

RECOMENDACIONES 2000

Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC)

Editado por J. A. McCleverty y N. G. Connelly

Traducción de E. A. Castro y E. J. Bottani

Asociación Química Argentina (AQA) - 2003

Auspiciado por la Sociedad Real de Química (RS•C)

NOMENCLATURA EN QUÍMICA INORGÁNICA II

Tabla Periódica de los elementos de IUPAC

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	n						
1 H																	2 He	1						
3 Li	4 Be																	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	2
11 Na	12 Mg																	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	3
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	4						
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	5						
55 Cs	56 Ba	* 57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	6						
87 Fr	88 Ra	‡ 89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun	111 Uuu	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	7						
* 57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu				6						
‡ 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr				7						

Unión Internacional de Química Pura y Aplicada

Nomenclatura de Química Inorgánica II

Recomendaciones 2000

Publicado por la Comisión de Nomenclatura de Química Inorgánica y editado por J. A. McCleverty y N. G. Connely

Traducción de E. A. Castro y E. J. Bottani, Asociación Química Argentina

RS•C & AQA

Royal Society of Chemistry y Asociación Química Argentina

ISBN 0-85404-487-6

A catalogue record for this book is available from the British Library.

© 2001 International Union of Pure and Applied Chemistry

All rights reserved.

Apart from any fair dealing for the purposes of research or private study, or criticism or review as permitted under the terms of the UK Copyright, Designs and Patents Act, 1988, this publication may not be reproduced, stored or transmitted, in any form or by any means, without the prior permission in writing of the International Union of Pure and Applied Chemistry, in the case of reprographic reproduction only in accordance with the terms of the licences issued by the Copyright Licensing Agency in the UK, or in accordance with the terms of the licences issued by the appropriate Reproduction Rights Organisation outside the UK. Enquiries concerning reproduction outside the terms stated here should be sent to the International Union of Pure and Applied Chemistry.

Published for the International Union of Pure and Applied Chemistry by the Royal Society of Chemistry,
Thomas Graham House, Science Park, Milton Road, Cambridge CB4 0WF, UK
Registered Charity Number 207890

For further information see the RSC web site at www.rsc.org and the IUPAC site at www.iupac.chemsoc.org

Typeset by RefineCatch Limited, Bungay, Suffolk
Printed by Bookcraft Ltd

TABLA DE CONTENIDOS

Autores principales de esta edición	3
Prefacio	4
II-1 POLIANIONES	6
II-1.1 Introducción	6
II-1.2 Numeración de polianiones condensados	8
II-1.3 Polianiones con seis átomos centrales	11
II-1.4 Polianiones con la estructura de Anderson	15
II-1.5 Polianiones con doce átomos centrales	16
II-1.6 Polianiones con dieciocho átomos centrales	25
II-1.7 Conclusión	27
II-2 COMPUESTOS INORGÁNIOS MODIFICADOS ISOTÓPICAMENTE	28
II-2.1 Introducción	29
II-2.2 Clasificación y simbolismo	29
II-2.3 Compuestos sustituidos isotópicamente	31
II-2.4 Compuestos marcados isotópicamente	32
II-2.5 Localizadores y numeración de compuestos modificados isotópicamente	39
II-2.6 Resumen de los tipos de compuestos modificados isotópicamente	42
II-3 COMPUESTOS METÁLICOS DE TETRAPIRROLES	43
II-3.1 Introducción	43
II-3.2 La construcción de los nombres sistemáticos	43
II-3.3 Nombres triviales	48
II-3.4 Tipos estructurales menos comunes	48
II-3.5 Nombres triviales de porfirinas, clorinas, clorofilas, bilanos, anillos fundamentales y especies relacionadas	52
II-4 HIDRUROS DE NITRÓGENO Y CATIONES, ANIONES Y LIGANDOS DERIVADOS	61
II-4.1 Introducción	61
II-4.2 Hidruros vinculados	61
II-4.3 Cationes	62
II-4.4 Aniones	62
II-4.5 Ligandos	63
II-4.6 Derivados orgánicos de los ligandos de hidruros de nitrógeno	68
II-5 COMPUESTOS INORGÁNICOS CÍCLICOS Y EN CADENA	70
II-5.1 Introducción	71

	2
II-5.2 Compuestos en cadenas no ramificadas y monocíclicos	71
II-5.3 Compuestos en cadenas ramificadas y policíclicos	86
II-5.4 Conclusión	106
II-6 COMPUESTOS DE INTERCALACIÓN GRAFÍTICOS	107
II-6.1 Consideraciones generales	107
II-6.2 Vocabulario	108
II-6.3 Clasificación de los compuestos de intercalación grafiticos	110
II-6.4 Descripción de compuestos de intercalación grafiticos sin fórmulas	111
II-6.5 Formulación de los compuestos de intercalación grafiticos	112
II-6.6 Notación estructural	113
II-7 POLÍMEROS INORGÁNICOS Y DE COORDINACIÓN DE CADENA SIMPLE REGULAR Y CUASI-SIMPLE	116
II-7.1 Introducción	117
II-7.2 Principios fundamentales	119
II-7.3 Recomendaciones	123
ÍNDICE ALFABÉTICO	141

AUTORES PRINCIPALES DE ESTA EDICIÓN

Capítulo II-1

Y. Jeannin, M. Fournier, *Francia*

Capítulo II-2

W.C. Fernelius, *USA*

T.D. Coyle, *USA*

W.H. Powell, *USA*

P. Fodor-Csányi, *Hungría*

Capítulo II-3

R.S. Laitinen, *Finlandia*

J.E. Merritt, *USA*

K.L. Loening, *USA*

Capítulo II-4

J. Chatt, *Reino Unido*

R.S. Laitinen, *Finlandia*

Capítulo II-6

H.P. Boehm, *Alemania*

R. Setton, *Francia*

E. Stumpp, *Alemania*

Capítulo II-7

L.G. Donaruma, *USA*

B.P. Block, *USA*

K.L. Loening, *USA*

N. Platé, *Rusia*

T. Tsuruta, *Japón*

K.Ch. Buschbeck, *Alemania*

W.H. Powell, *USA*

J. Reedijk, *Holanda*

Prefacio

Este libro se ha preparado con la intención de complementar el primer volumen publicado en 1990, el cual contiene los propósitos, la gramática, los objetivos básicos y las principales clases de nomenclatura. El lector debe consultar ese primer volumen para consultar esos aspectos básicos. Este volumen tiene el fin de tratar con la nomenclatura de los sistemas que presentan dificultades específicas con las fases condensadas, tales como los sólidos o los polímeros y para los cuáles se han generado varias clases de nomenclaturas locales al punto de confundir a los especialistas o a aquellos que acceden a este campo de investigación. Esta obra considera compuestos químicos tan diversos como polianiones, modificaciones isotópicas, tetrapirroles, hidruros de nitrógeno, anillos inorgánicos, cadenas, polímeros y compuestos de intercalación grafiticos. Este libro está orientado a poner orden en la nomenclatura de estos sistemas especiales en base a la nomenclatura más fundamental descrita en el primer volumen y en las publicaciones de nomenclatura orgánica. El volumen es oportuno, especialmente con relación al crecimiento de los polímeros inorgánicos y es esperable que los especialistas acepten las recomendaciones propuestas metódicamente y la empleen para simplificar la literatura, especialmente para los estudiantes que ahora empiezan a estudiar estos sistemas.

Los diversos capítulos han estado sujetos a una revisión extensiva no sólo de parte de los miembros de la Comisión sino también por químicos en actividad en las diversas áreas a lo largo de varios años. En consecuencia, los capítulos desarrollados representan una visión consensuada de la nomenclatura apropiada para esta época y para algunos próximos años. La Comisión agradece a los revisores externos por sus comentarios cuidados y críticos y por el apoyo para poner orden en la nomenclatura de tales sistemas complejos. Asimismo, como los tópicos están poco vinculados y cada uno de ellos tiene una Introducción, no resulta necesaria una introducción general y el lector consultar el primer volumen para tales comentarios generales sobre la nomenclatura.

1 de julio de 2000

ALAN SARGESON
HERBERT D. KAESZ

Presidentes, Comisión de Nomenclatura de Química Inorgánica de la IUPAC

Nomenclatura de Química Inorgánica II
RECOMENDACIONES 2000

II-1 Polianiones

CONTENIDOS

- II-1.1 Introducción
- II-1.2 Numeración de polianiones condensados
 - II-1.2.1 Elección de los ejes de referencia
 - II-1.2.2 Elección del plano esquelatal terminal preferido
 - II-1.2.3 Elección del plano de simetría de referencia
 - II-1.2.4 Numeración de los átomos centrales
 - II-1.2.5 Designación de los vértices del octaedro
- II-1.3 Polianiones con seis átomos centrales
 - II-1.3.1 Homopolianiones (isopolianiones)
 - II-1.3.2 Polianiones heterocéntricos
 - II-1.3.2.1 Mono o polisustitución
 - II-1.3.2.2 Polianiones heterocéntricos reducidos
 - II-1.3.3 Heteroligandos polianiónicos
 - II-1.3.3.1 Sustitución simple
 - II-1.3.3.2 Sustituciones múltiples
 - II-1.3.4 Nombres de especies más complicadas
- II-1.4 Polianiones con la estructura de Anderson
 - II-1.4.1 Polianiones con varios átomos centrales
 - II-1.4.2 Nombres de especies más complicadas
- II-1.5 Polianiones con doce átomos centrales
 - II-1.5.1 Compuestos con la estructura de Keggin e isómeros
 - II-1.5.1.1 Compuestos que contienen sólo una clase de metal de transición
 - II-1.5.1.2 Compuestos con varios metales de transición, es decir, compuestos sustituidos
 - II-1.5.1.3 Sustitución de ligandos
 - II-1.5.1.4 Compuestos reducidos
 - II-1.5.2 Compuestos en los cuales los átomos centrales faltan (estructuras defectuosas)
 - II-1.5.2.1 Compuestos con una vacancia
 - II-1.5.2.2 Compuestos con tres vacancias
- II-1.6 Polianiones con dieciocho átomos centrales
- II-1.7 Conclusión

II-1.1 INTRODUCCIÓN

Un polianión está formado por condensación de varios aniones simples con eliminación de agua. Estas especies cargadas negativamente poseen estructuras constituidas principalmente por octaedros (politungstatos o polimolibdatos), tetraedros (polifosfatos), y a veces octaedros y tetraedros (politungstatos o polimolibdatos). Los octaedros y los tetraedros consisten en un átomo central rodeado por seis o cuatro átomos, respectivamente, los cuales son referidos como ligandos en este Capítulo. Los octaedros y los tetraedros comparten bordes o vértices. La estructura considerada como una vinculada no sustituida es aquella que contiene oxígenos como ligandos. Los átomos centrales pueden ser átomos de

metales o, a veces, no-metales. Se conocen algunos casos inusuales de 5 átomos de coordinación y 7 átomos de coordinación.

Un átomo central o un ligando pueden ser reemplazados. Entonces, cada posición atómica debe ser numerada a los fines de ser reconocible y para distinguir isómeros. En la nomenclatura de los compuestos de coordinación, se han sugerido letras minúsculas como localizadores designantes para el señalamiento de vértices. A los átomos centrales comúnmente no se le han dado designadores localizadores; sin embargo, los números localizantes se han empleado para numerar los átomos metálicos en los agregados homoatómicos. En el primer caso, la posición de un átomo ligando en el poliedro de coordinación está dada por una letra minúscula. En el último caso, el átomo ligando se indica por un número que define el átomo central al cual está unido; si el ligando hace de puente entre varios átomos centrales, se usan varios números. De tal forma, coexisten dos sistemas localizadores.

En el caso específico de los polianiones, surgen dificultades porque ambos átomos centrales y los ligandos pueden ser reemplazados. El número de vértices de una especie condensada es, en la mayor parte de los casos, bastante grande: por ejemplo, $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$ posee 40 vértices y está lejos de ser el mayor polianión conocido. Obviamente, las 27 letras del alfabeto no son suficientes si ellas se usan para la designación de cada posición de los vértices. Como es necesario distinguir a los isómeros, se debe idear una designación sin ambigüedades para los átomos centrales y para los vértices. Además, el uso de los números de dos átomos centrales no es suficiente para designar átomos puenteantes porque pueden existir dos o más puentes entre esos mismos dos átomos centrales.

Se propone el siguiente sistema de numeración:

- (a) se asigna un número a cada átomo central: 1, 2, 3, etc.,
- (b) se asigna una letra a cada vértice del poliedro:

octaedro – a, b, c, d, e, f
tetraedro – a, b, c, d.

Luego, un vértice se designa por un número seguido de una letra, el número se refiere al átomo central, por ejemplo 1a, 3d, etc. Así, cuando dos octaedros comparten un vértice, éste tiene dos designaciones, una del primer octaedro y una del segundo octaedro, cada octaedro rodeando a su átomo central. La designación con el menor número del átomo central tiene prioridad. Por ejemplo, si un vértice es 1d en el primer octaedro y 4a en el segundo, el mismo es designado como 1d.4a. Tal designación múltiple puede parecer redundante. Sin embargo, ella puede ser útil: por ejemplo, en una discusión que involucra a los ligandos localizados en los vértices 1d y 4f, si 4a es una alternativa para 1d, entonces 4a puede ser usada en vez de 1d para hacer bastante obvio que los dos vértices, 4a y 4f, pertenecen al mismo octaedro. Además, esta designación doble hace bastante sencillo nombrar a un vértice común: por ejemplo 1d.4a muestra que el vértice 1d también es 4a puenteando así a los átomos centrales 1 y 4 con los vértices d y a, respectivamente.

El sistema de numeración usado en este Capítulo es consistente con los principios desarrollados para los compuestos de boro tipo caja en la Sección I-11 de la Nota 1a y los

nombres están basados en la nomenclatura de coordinación en el mismo texto (Sección I-10 de la Nota 1a), y no sobre la base de la nomenclatura tradicional de oxoaniones; como por ejemplo es tetraoxofosfato(3-) y no fosfato.

II-1.2 NUMERACIÓN DE POLIANIONES CONDENSADOS

La numeración de una estructura condensada se basa en la estructura relacionada no sustituida para el polianión. Los átomos centrales de las unidades octaédricas se numeran y las posiciones de los ligandos se indican por un conjunto secundario de letras localizantes.

Los poliedros contruidos de octaedros contienen ejes de simetría de rotación y planos esqueletales. Tales planos se definen como aquellos planos (o cuasi-planos) que contienen varios centros octaédricos.

Las siguientes recomendaciones de numeración se aplican secuencialmente.

II-1.2.1 Elección del eje de referencia (ver Figura II-1.1)

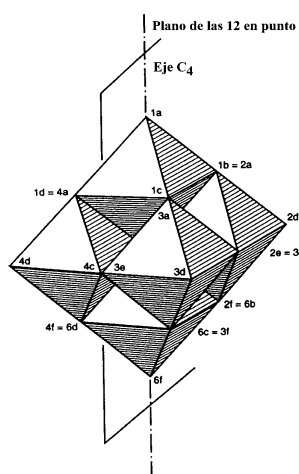


Figura II-1.1. Arreglo octaédrico y señaldores localizantes en la estructura de Lindqvist.

- El eje de referencia es el eje rotacional de mayor orden de la estructura del polianión y se orienta verticalmente.
- Se buscan los planos esqueletales perpendiculares al eje de referencia. Un plano esqueletal que está localizado más lejos del centroide del polianión se describe como un plano esqueletal terminal, y los demás como planos esqueletales internos.
- Cuando hay más de un eje de simetría de mayor orden, el eje preferido es aquel que es perpendicular al mayor número de planos esqueletales.
- Cuando el polianión no posee un eje de simetría rotacional, el eje de referencia es el eje perpendicular al plano esqueletal con el mayor número de centros octaédricos.

II-1.2.2 Elección del plano esqueletal terminal preferencial

- El plano esqueletal terminal preferido es aquel plano con el menor número de átomos centrales. El eje de referencia está entonces orientado de tal forma que el plano terminal preferencial es el más elevado.

- (b) Cuando ambos planos terminales contienen el mismo número de átomos centrales, el plano preferencial es aquel con el menor número de octaedros condensados fundidos (dicho de otra forma: cuando el número de puentes entre los átomos centrales es el menor; la coparticipación de vértices es menos condensada que la coparticipación de aristas que es menos condensada que la coparticipación de caras).
- (c) Ver Sección II-1.2.4 más abajo.
- (d) Cuando hace falta una elección posterior, las reglas precedentes se aplican considerando el primer plano esquelatal interno y así siguiendo.

II-1.2.3 Elección del plano de simetría de referencia

- (a) El plano de referencia se define como el plano de simetría que contiene al eje de referencia y que también incluye el menor número de átomos centrales.
- (b) Cuando hay más de un plano de simetría de referencia que satisface este requerimiento, entonces el plano preferencial es aquel que contiene el mayor número de átomos en común con el plano esquelatal terminal preferido.
- (c) El plano de simetría de referencia se divide por el eje de referencia en dos mitades que deben ser designado. Se define una línea entre las 6 en punto y las 12 en punto por la intersección del plano de simetría de referencia y un plano esquelatal; así éste es perpendicular al eje de referencia, y la posición 12 en punto está en la mitad del plano de referencia que contiene el mayor número de átomos centrales; la posición 6 en punto designa la otra mitad.
- (d) Ver Secciones II-1.2.4 y II-1.2.5 más abajo.
- (e) Cuando se deja una elección, entonces se escoge la posición 12 en punto sobre un átomo ligando.

II-1.2.4 Numeración de los átomos centrales

- (a) Los átomos centrales se numeran a partir de la posición 12 en punto en el plano esquelatal terminal preferencial y rotando en sentido horario (o antihorario). Cuando un plano esquelatal está completamente numerado se prosigue con el plano esquelatal siguiente ubicado inmediatamente por debajo. El primer átomo a ser numerado es el que se encuentra comenzando por la posición de las 12 en punto, girando en sentido horario o antihorario, dependiendo del requerimiento del localizador más bajo [ver Secciones II-1.2.4(b) y II- 1.2.5].
- (b) Cuando se sustituye un átomo central o un ligando (ver Sección II-1.2.5), ello no baja la simetría del esqueleto para la elección del eje de simetría de referencia y para la elección del plano de simetría de referencia. Sin embargo, los localizadores se eligen de manera tal que un átomo central o un ligando que aparece primero en la Tabla II-1 tiene el menor número o la letra de menor orden de aparición en el alfabeto. Sin embargo, la elección del primer plano esquelatal tal como se define en la Sección II-1.2.2 tiene prioridad respecto del número de un átomo central sustituyente. Cuando el polianión contiene varios átomos centrales de distintas especies atómicas, el mayor número de átomos de las especies apareciendo primero en la Tabla II-1 se numerará antes que el átomo que aparece en segundo término en esta Tabla y así siguiendo.

Tabla II-1 Secuencia de prioridad de los elementos

The diagram illustrates the sequence of element priorities in the periodic table, starting from Hydrogen (H) and following a path through various groups and periods, ending at Astatine (At). The path is indicated by arrows and loops.

The sequence of elements is as follows:

- He
- Li
- Be
- B
- C
- N
- O
- F
- Ne
- Na
- Mg
- Al
- Si
- P
- S
- Cl
- Ar
- K
- Ca
- Sc
- Ti
- V
- Cr
- Mn
- Fe
- Co
- Ni
- Cu
- Zn
- Ga
- Ge
- As
- Se
- Br
- Kr
- Rb
- Sr
- Y
- Zr
- Nb
- Mo
- Tc
- Ru
- Rh
- Pd
- Ag
- Cd
- Hg
- Xe
- Cs
- Ba
- La
- Ce
- Pr
- Nd
- Pm
- Sm
- Eu
- Gd
- Tb
- Dy
- Ho
- Er
- Tm
- Yb
- Lu
- Hf
- Ta
- W
- Re
- Os
- Ir
- Pt
- Au
- Pb
- Bi
- Po
- At
- Rn

The path starts at H, goes down to He, then right to Li, then down to Be, then right to B, then down to C, then right to N, then down to O, then right to F, then down to Ne. From Ne, it goes down to Na, then right to Mg, then down to Al, then right to Si, then down to P, then right to S, then down to Cl, then right to Ar. From Ar, it goes down to K, then right to Ca, then down to Sc, then right to Ti, then down to V, then right to Cr, then down to Mn, then right to Fe, then down to Co, then right to Ni, then down to Cu, then right to Zn, then down to Ga, then right to Ge, then down to As, then right to Se, then down to Br, then right to Kr. From Kr, it goes down to Rb, then right to Sr, then down to Y, then right to Zr, then down to Nb, then right to Mo, then down to Tc, then right to Ru, then down to Rh, then right to Pd, then down to Ag, then right to Cd, then down to Hg, then right to Tl, then down to Pb, then right to Bi, then down to Po, then right to At. Finally, it goes down to Rn.

II-1.2.5 Designación de los vértices del octaedro

- (a) En cada octaedro las letras localizantes se asignan a los vértices como sigue: Definir un eje que pase a través del átomo central del octaedro considerado y que sea paralelo al eje de referencia principal. Este eje definido es el eje de referencia local. Estos dos ejes determinan un nuevo plano de referencia válido sólo para este octaedro. Los vértices del octaedro se encuentran en los planos esqueléticos locales perpendiculares a estos dos ejes. En cada plano esquelético local, la línea local 6 en punto – 12 en punto es la línea que interseca al eje de referencia local y el eje de referencia principal. La intersección con el eje principal es la posición 12 en punto en el plano esquelético local considerado. Las letras a, b, c, d, e, f se asignan a partir del plano esquelético local superior. A los (posiblemente varios) vértices en un dado plano esquelético local se les asignan letras rotando en sentido horario alrededor del eje local, empezando por la posición local 12 en punto. Si los ejes local y principal coinciden, entonces el plano local de referencia es el plano de referencia del polianión. Las mismas reglas se aplican secuencialmente para dar una letra designadora localizante a cada vértice.
- (b) Si existe una elección en la asignación de localizante de letra a los vértices, éstos se ordenan de acuerdo a la posición en la Tabla II-1 de los átomos ligantes que los ocupan. A una posición previa en esta Tabla se le asigna una letra previa en el alfabeto. A este respecto, los ligandos monoatómicos preceden a los ligandos poliatómicos con el mismo átomo ligando, por ejemplo, los átomos de oxígeno de OH ó CH₃COO se consideran que vienen inmediatamente después del oxígeno y antes que cualquier otro elemento.

II-1.3 POLIANIONES CON SEIS ÁTOMOS CENTRALES

El K₈[Nb₆O₁₉] es el primer ejemplo representativo de un polianión metálico con seis átomos centrales que posee esta estructura determinada por Lindqvist. La estructura idealizada posee una simetría O_h (Figura II-1.1). Se conocen varias modificaciones de esta estructura:

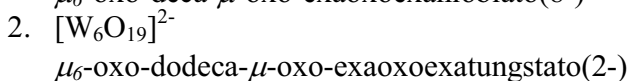
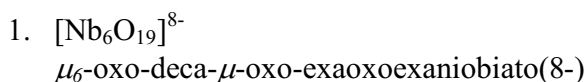
- (a) Todos los átomos centrales son idénticos: tales iones comúnmente se denominan isopolianiones pero un mejor nombre es el de homopolianiones;
- (b) Uno o más átomos centrales son sustituidos; estos iones normalmente se denominan polianiones mixtos o heteropolianiones.
- (c) Algunos ligandos son sustituidos.

Como la sustitución puede tener lugar tanto en un átomo central como en el sitio de un ligando, estos iones sustituidos se denominan polianiones heterocéntricos o polianiones heteroligantes, respectivamente.

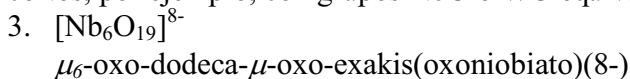
II-1.3.1 Homopolianiones (isopolianiones)

En esta estructura, el átomo metálico posee sólo átomos de oxígeno como ligandos y hay seis octaedros fusionados; es suficiente contar el número de oxígenos de cada clase, es decir, de la misma coordinación.

Ejemplos:

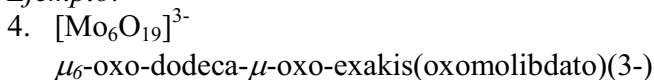


Los prefijos multiplicativos se pueden usar para suministrar nombres alternativos más cortos, por ejemplo, con grupos NbO o WO equivalentes.



Un homopolianión (isopolianión) se puede reducir sin localización electrónica. Tales compuestos están caracterizados por absorciones de transferencia de carga de intervalencia en sus espectros electrónicos y comúnmente se denominan "compuestos de valencia mixta". Los nombres previos se usan con la carga resultante expresada por el número de carga. Por ejemplo, el $[\text{Mo}_6\text{O}_{19}]^{2-}$ se puede reducir a $[\text{Mo}_6\text{O}_{19}]^{3-}$ el cual se puede nombrar como sigue:

Ejemplo:



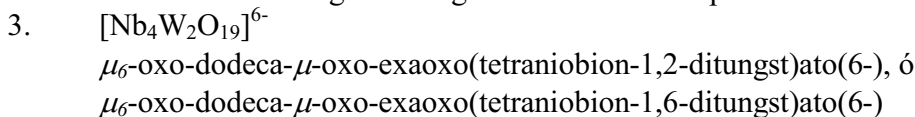
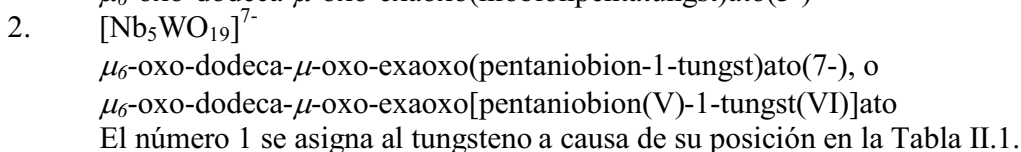
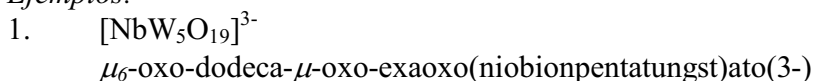
Sin embargo, cuando es necesario expresar la localización electrónica en la especie reducida, el polianión se denomina de la misma forma que un polianión heterocéntrico. En este caso, el átomo con menor estado de oxidación se coloca primero en la fórmula y precede a aquellos con valencia mayor en el nombre. Cuando se numeran los átomos centrales, el menor número posible se asigna al átomo reducido.

II-1.3.2 Polianiones heterocéntricos

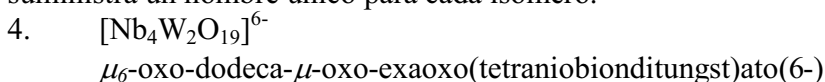
II-1.3.2.1 Mono o polisustitución

En los nombres, los átomos centrales se citan en orden alfabético independientemente del esquema de numeración.

Ejemplos:



En este ejemplo, hay dos isómeros y ellos se designan como *cis* y *trans*. El sistema de numeración delineado anteriormente acoplado con la nomenclatura de coordinación suministra un nombre único para cada isómero.



Cuando las posiciones sustituidas no se conocen, los designadores locales no son dados.

5. $[\text{V}_2\text{W}_4\text{O}_{19}]^{4-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo(tetratungst-5,6-divanadi)ato(4-), o
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo(tetratungst-3,5-divanadi)ato(4-)

Los localizadores del vanadio están relacionados con la posición del vanadio en la Tabla II.1.

6. $[\text{NbVW}_4\text{O}_{19}]^{4-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo(5-niobiotetratungst3-vanad)ato(4-)

II-1.3.2.2 Polianiones reducidos heterocéntricos

Generalmente, el átomo central más fácilmente reducible es conocido.

Ejemplos:

1. $[\text{Nb}_5\text{WO}_{19}]^{8-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo[pentaniobi(V)tungst]ato
 En este ejemplo, el tungsteno es reducido. En casos más complicados, puede ser usado el número de carga.
2. $[\text{Nb}_4\text{W}_2\text{O}_{19}]^{7-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo(tetraniobi-1,6-ditungst)ato(7-)
 En este ejemplo, el compuesto ha sido reducido por un electrón; el mismo es un ión de valencia mixta. Si el electrón está localizado (compuesto hipotético), es posible indicar el átomo reducido empleando los números de oxidación.
 Por ejemplo:
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exaoxo[tetraniobi(V)-1-tungst(V)-6-tungst(VI)]ato.

II-1.3.3 Polianiones heteroligantes

En los compuestos previos, los átomos metálicos están rodeados por oxígenos ligandos. Estos pueden ser reemplazados por ligandos azufre, hidróxidos, etc.

II-1.3.3.1 Sustitución simple

Cuando tiene lugar una sola sustitución, se pueden usar los nombres abreviados sin localizadores.

Ejemplo:

1. $[\text{W}_6\text{O}_{18}\text{S}]^{2-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-pentaoxotioexatungstato(2-), ó
 μ_6 -oxo-undeca- μ -oxo-exaoxo- μ -tio-exatungstato(2-), ó
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-pentaoxo-1a-tioexatungstato(2-), ó
 μ_6 -oxo-undeca- μ -oxo-exaoxo-1b- μ -tio-exatungstato(2-)

II-1.3.3.2 Sustituciones múltiples

Cuando dos átomos de oxígeno de un homopolianión (isopolianión) se reemplazan, la numeración es entonces necesaria. El orden de numeración de los átomos centrales puede depender del orden de ubicación en la Tabla II.1 del átomo ligando del grupo reemplazante.

Ejemplos:

1. $[\text{Mo}_6\text{O}_{17}\text{S}_2]^{2-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-tetraoxo-5d.6f-ditioexamolibdato(2-)
2. $[\text{W}_6\text{O}_{17}(\text{OH})\text{S}]^-$
5f- μ -hidroxio- μ_6 -oxo-undeca- μ -oxo-pentaoxo-6f-tioexatungstato(1-)
Un átomo de oxígeno terminal se reemplaza por un átomo de azufre, y un oxígeno puente se reemplaza por un grupo hidroxilo.
3. $[\text{NbW}_5\text{O}_{18}]^{3-}$
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-pentaoxo-1a-tio(6-niobionpentatungst)ato(3-)
El átomo de azufre es terminal y está unido al tungsteno.
4. $[\text{Mo}_6\text{O}_{17}(\text{OH})_2]^{2-}$
1e.2e-di- μ -hidroxio- μ_6 -oxo-deca- μ -oxo-exaoxo[1,2-dimolibden(V)-tetra-
-molibden(VI)]ato

Este compuesto tiene un nombre trivial: azul de molibdeno. Es un compuesto bieletrónico reducido que también posee hidroxilos fijos.

II-1.3.4 Nombres de especies más complicadas

Ejemplos:

1. $[\text{CeW}_{10}\text{O}_{36}]^{8-}$ (Figura II-1.2)
bis(μ_5 -oxo-octa- μ -oxo-nonaoxopentatungstato)cerato(8-)

Este compuesto se deriva de la estructura de Lindqvist por pérdida de un átomo de tungsteno; entonces dos de tales grupos se coordinan a un átomo de cerio.

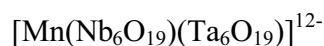
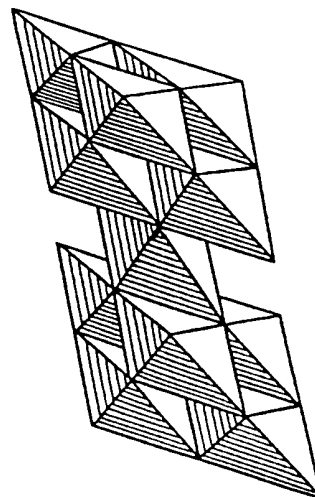
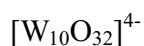
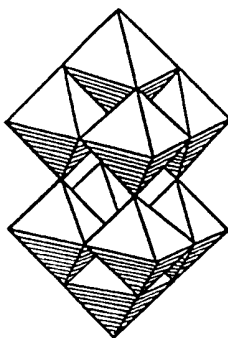
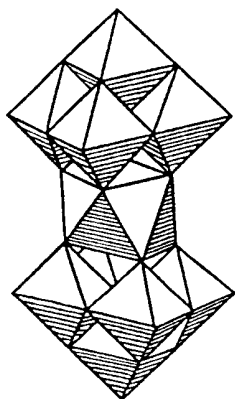


Figura II-1.2. Ejemplos de polianiones derivados de la estructura de Lindqvist. El $[\text{CeW}_{10}\text{O}_{36}]^{8-}$ está formado por dos subunidades W_5O_{18} unidas por el Ce y los átomos de oxígeno formando un entorno antiprismático; el $[\text{W}_{10}\text{O}_{32}]^{4-}$ está compuesto por dos subunidades W_5O_{18} unidas directamente; el $[\text{Mn}(\text{Nb}_6\text{O}_{19})(\text{Ta}_6\text{O}_{19})]^{12-}$ está constituido por dos unidades de Lindqvist unidas por un átomo de Mn y los átomos de oxígeno forman un entorno octaédrico.

2. $[\text{W}_{10}\text{O}_{32}]^{4-}$ (Figura II-1.2)tetra- μ -oxo-bis[μ_5 -oxo-octa- μ -oxo-pentakis(oxotungstato)](4-)

Este compuesto tiene un nombre trivial: tungstato Y; el mismo está compuesto por dos unidades idénticas que comparten cuatro vértices; cada unidad se deriva de la estructura de Lindqvist por pérdida de un átomo de tungsteno.

3. $\text{Mn}(\text{Nb}_6\text{O}_{19})(\text{Ta}_6\text{O}_{19})^{12-}$ (Figura II-1.2)
 μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exakis(oxoniobiato)(8-)- O^{1b}, O^{1c}, O^{2c}][μ_6 -oxo-dodeca- μ -oxo-exakis(oxotantalato)(8-)- O^{1b}, O^{1c}, O^{2c}]manganato(12-) (Nota 1b)

Este compuesto contiene dos unidades de Lindqvist; cada una de ellas está unida por tres átomos de oxígeno ligados al manganeso, el cual está rodeado por un octaedro de ligandos de átomos de oxígeno.

II-1.4 POLIANIONES CON LA ESTRUCTURA DE ANDERSON

II-1.4.1 Polianiones con varios átomos centrales

Estos compuestos se derivan del $[\text{NH}_4]_6[\text{Mo}_6\text{TeO}_{24}]$, la estructura de la cual fue propuesta por Anderson y determinada por Evans. Los siete átomos de telurio y molibdeno están todos rodeados octaédricamente y en el mismo plano, o aproximadamente así (Figura II-1.3). Estos polianiones tienen una simetría D_{3d} . Ejemplos de ello son $[\text{Mo}_6\text{TeO}_{24}]^{6-}$, $[\text{IMo}_6\text{O}_{24}]^{6-}$ y $[\text{H}_6\text{CrMo}_6\text{O}_{24}]^{3-}$.

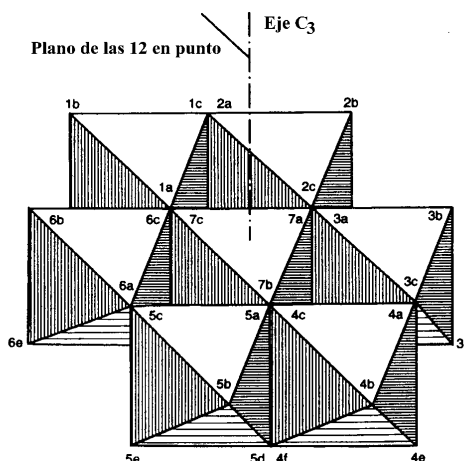


Figura II-1.3. Arreglo octaédrico y designadores localizantes en la estructura de Anderson.

Los átomos centrales, que están rodeados octaédricamente, son considerados equivalentes y sus nombres y símbolos se citan en orden alfabético tanto en las designaciones como en las fórmulas. La numeración de estas estructuras se logra empezando con los octaedros periféricos, denominado la corona, donde el átomo central de la corona está inserto en la Tabla II-1. Así, se puede indicar claramente la analogía estructural entre todos estos compuestos y aquellos donde el átomo central localizado en el

Nota 1b : Cuando un nombre es dividido por dos o más líneas de texto, se repite un guión que es parte integral de ese nombre y que ocurre al final de la línea y se repite al principio de la siguiente.

centro de la corona puede ser quitado y reemplazado por dos tetraedros, uno en cada lado de la corona (ver II-1.4.2).

Ejemplos:

1. $[\text{Mo}_6\text{TeO}_{24}]^{6-}$
hexa- μ_3 -oxo-exa- μ -oxo-dodecaoxo(examolibden-7-telurin)ato(6-)
2. $[\text{H}_6\text{CrMo}_6\text{O}_{24}]^{3-}$
hexa- μ_3 -hidroxo-exa-oxo-dodecaoxo[7-cromi(III)examolibden]ato(3-)

En este ejemplo las posiciones de los hidrógenos no se conocen, pero se supone que ellos son parte de los grupos hidroxilos de los seis puentes μ_3 . Si no se muestran las posiciones de los hidrógenos el nombre podría ser exahidrogenexa- μ_3 -oxo-exa- μ -oxo-dodecaoxo[7-cromon(III)examolibden]ato(3-).

Un isómero de este anión, $[\text{H}_6\text{CrMo}_6\text{O}_{24}]^{3-}$, ha sido postulado con el átomo de cromo en la corona periférica.

3. $[\text{H}_6\text{CrMo}_6\text{O}_{24}]^{3-}$
1b.1e.diacua-1a.1f-di- μ_3 -hidroxo-1.1d-di- μ -hidroxo-2c-3f,4c.5f-tetra- μ_3 -oxo-2f.3c,4f.5c-tetra- μ -oxo-decaoxo[1-cromon(III)examolibden]ato

II-1.4.2 Nombres de especies más complicadas

Hay varios ejemplos de polianiones derivados del polianión tipo Anderson. Tales compuestos usualmente tienen una simetría D_{3d} . La estructura comprende seis octaedros fusionados en una corona más dos tetraedros unidos en su base sobre cada lado de la corona. Estos tetraedros comparten tres átomos de oxígeno con los seis octaedros.

Ejemplos:

1. $[\text{As}_2\text{Mo}_6\text{O}_{26}]^{6-}$
exa- μ -oxo-bis- μ_6 —(tetraoxoarsenato- O, O', O'')-exakis(dioxomolibdato)(6-)
2. $[\text{Mo}_8\text{O}_{26}]^{4-}$
exa- μ -oxo-bis- μ_6 —(tetraoxomolibdato- O, O', O'')-exakis(dioxomolibdato)(4-)
3. $[\text{Mo}_6\text{O}_{24}(\text{AsC}_6\text{H}_5)_2]^{4-}$
exa- μ -oxo-bis- μ_6 —(fenilarsonato- O, O', O'')-exakis(dioxomolibdato)(4-)

II-1.5 POLIANIONES CON DOCE ÁTOMOS CENTRALES

La estructura del anión $[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$ se conoce como la estructura de Keggin. Muchos compuestos poseen esta estructura o una estrechamente relacionada. En tales fórmulas el heteroátomo se cita primero a fin de conformar el uso ordinario en la química de los heteropolianiones. Si hay varios átomos metálicos distintos, ellos se citan en orden alfabético. Finalmente, los símbolos de los ligandos se citan como en las fórmulas de los compuestos de coordinación.

II-1.5.1 Compuestos con la estructura de Keggin e isómeros

II-1.5.1.1 Compuestos que contienen sólo una clase de metal de transición

Esta familia se caracteriza por la fórmula general $[\text{XM}_{12}\text{O}_{40}]^n$, como por ejemplo $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$ ó $[\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$. M puede ser tungsteno o molibdeno; X puede ser silicio, germanio, fósforo, arsénico o boro.

El polianión está constituido por cuatro grupos M_3O_{13} que comparten vértices. Tal grupo tiene un eje trigonal de simetría y contiene tres octaedros compartiendo aristas. Los tres octaedros poseen un vértice común que también es un vértice del tetraedro central XO_4 . El grupo central XO_4 es tratado como un ligando puente. La estructura tiene simetría T_d (Figuras II-1.4 y II-1.5). En algunos casos X puede estar ausente.

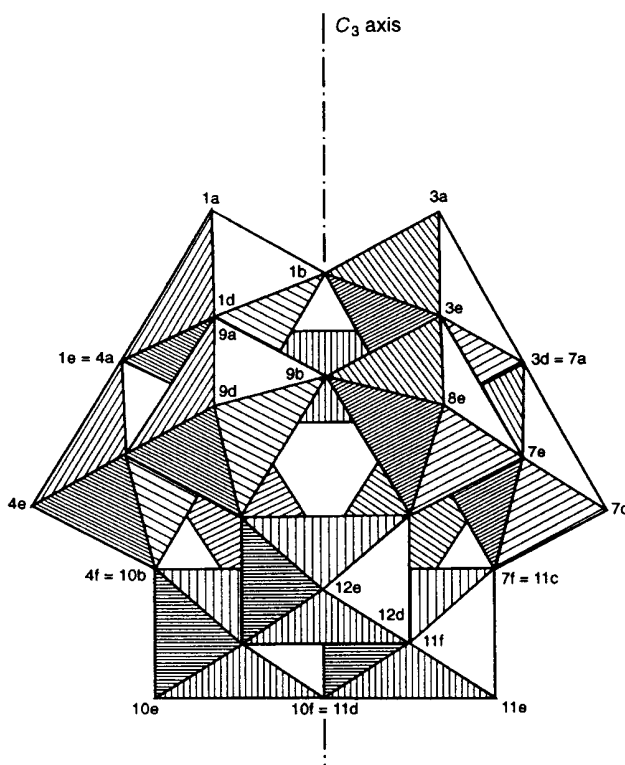


Figura II-1.4. Arreglo octaédrico y designadores localizantes en la estructura de Keggin (isómero 1). Este isómero, algunas veces llamado α , tiene simetría T_d .

Ejemplo:

1. $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$
1c.2b,1b.3c,1e.4a,1d.9a,2c.3b,2d.5a,2e.6a,3d.7a,3e.8a,4c.5b,4d.9e,4f.10b,5e.6d,5f.10c,
6c.7b,6f.11b,7e.8d,7f.11c,8c.9b,8f.12b,9f.12c,10f.11d,10d.12f,11f.12d-tetracosam- μ -oxo-
- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10,11,12}$)-dodecakis(oxotungstato)(4-)

Pueden existir cinco isómeros en la estructura precedente, uno o más grupos M_3O_{13} pueden ser rotados por 60° alrededor de sus ejes de tercer orden. Esto acarrea una dificultad adicional a la nomenclatura de estos polianiones. Dos estructuras se denominan corrientemente α y β . La primera (α) posee la estructura de Keggin, es decir una simetría T_d . La segunda (β) se deriva por rotación de un grupo M_3O_{13} (Figuras II-1.6 y II-1.7). Ella tiene simetría C_{3v} . El tercer isómero conocido está ilustrado por $[\text{Al}_{13}\text{O}_4(\text{OH})_{24}(\text{H}_2\text{O})_{12}]^{7+}$ donde el grupo central es AlO_4 . En este compuesto los cuatro grupos están rotados con

respecto al isómero α y la simetría es Td . La numeración de los átomos centrales del octaedro está asignada en forma bien determinada.

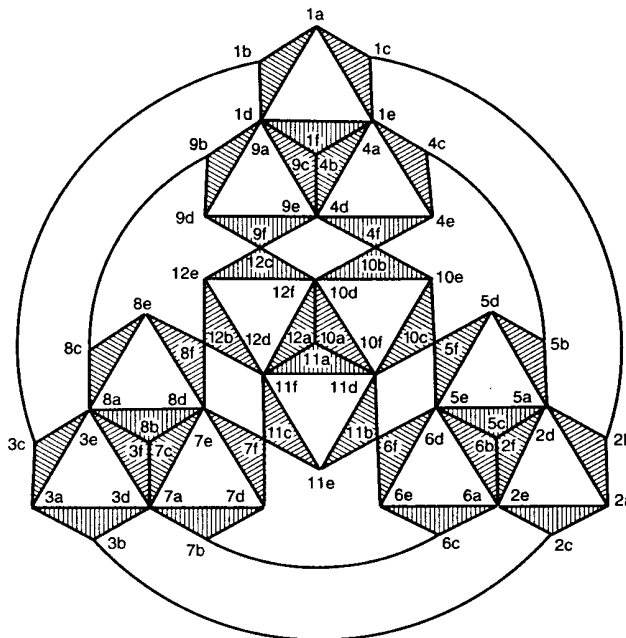


Figura II-1.5. Estructura de Keggin bidimensional abierta; las líneas curvas unen a los vértices de los octaedros que son compartidos en la estructura tridimensional actual (isómero 1).

Ejemplo:

2. $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$; trivialmente denominado β (Figura II-1-6)
 1c.2b,1b.3c,1e.4a,1d.9a,2c.3b,2d.5a,2e.6a,3d.7a,3e.8a,4c.5b,4d.9e, 4f.10c,5e.6d,5f.11b,
 6c.7b,6f.11c,7e.8d,7f.12b,8c.9b,8f.12c,9f.10b,10f.11d,10d.12f,11f.12d-tetracosa- μ -
 -oxo-10f.11d,10d.12f,11f.12d-tetracosa- μ -oxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}$, $O^{2.5.6}$, $O^{3.7.8}$,
 $O^{10.11.12}$)-dodecakis(oxotungstato)(4-)

A los fines de mantener a los nombres en la forma más sencilla posible, sólo los átomos de oxígeno que unen a los planos esqueléticos deben ser designados. Estos átomos de oxígeno están dados por un conjunto de dos números que se refieren a los átomos centrales unidos por los átomos de oxígeno en consideración. De esto resulta la siguiente secuencia de números para los oxígenos de puente que diferencian claramente a los cinco isómeros (Figura II-1.7):

- la estructura básica de Keggin: isómero 1 (α)
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12
- un grupo M_3O_{13} se rota por 60° : isómero 2 (β)
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10
- dos grupos M_3O_{13} se rotan por 60° : isómero 3 (γ)

- 1.3,1.6,2.4,2.5,3.7,3.9,4.7,4.10,5.8,5.11,6.8,6.12,7.9,7.10,8.11,8.12
- tres grupos M_3O_{13} se rotan por 60° : isómero 4 (δ)
1.4,1.6,2.4,2.5,3.5,3.6,4.7,4.8,5.9,5.10,6.11,6.12
- cuatro grupos M_3O_{13} se rotan por 60° : $[Al_{13}H_{48}O_{40}]^{7+}$ isómero 5 (ε)

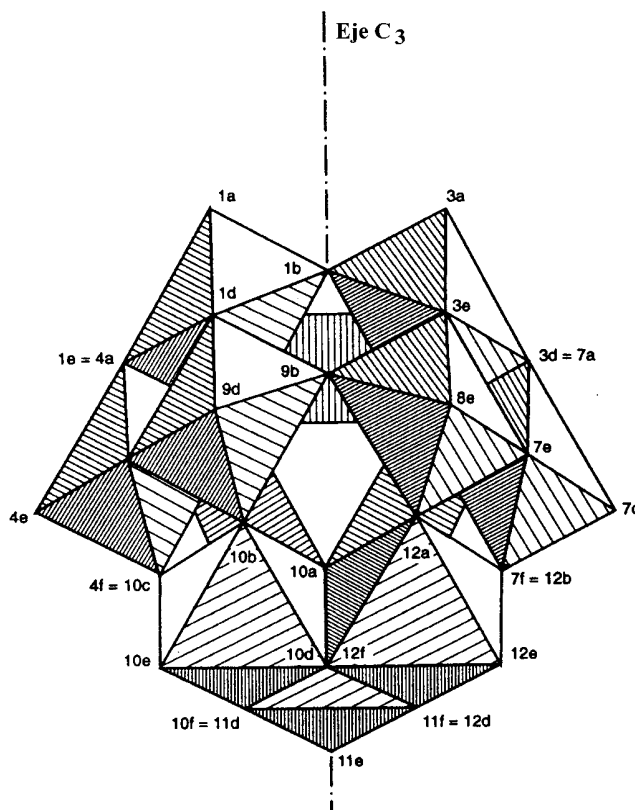


Figura II-1.6. Arreglo octaédrico y designadores localizantes en el isómero 2, que posee simetría C_{2v} , derivada del isómero 1 (estructura de Keggin, Fig. II-1.7) por rotación de 60° de un grupo W_3O_{13} . Corrientemente este isómero se denomina β .

Ejemplos:

3. $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$, estructura de Keggin
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-dodeca- μ -oxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}O^{2.5.6}O^{3.7.8}O^{10.11.12}$)-tetrakis[tri- μ -oxo-tris(oxotungstato)](4-)
4. $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$, un grupo M_3O_{13} rotado
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-dodeca- μ -oxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}O^{2.5.6}O^{3.7.8}O^{10.11.12}$)-tetrakis[tri- μ -oxo-tris(oxotungstato)](4-)
5. $[Al_{13}H_{48}O_{40}]^{7+}$ (Figura II-1.7)
1.4,1.4,2.5,2.5,3.6,3.6,4.7,4.12,5.8,5.9,6.10,6.11-dodeca- μ -hidroxo- μ_{12} -(tetraoxoaluminato- $O^{1.2.3}O^{4.7.12}O^{5.8.9}O^{6.10.11}$)-tetrakis[tri- μ -hidroxo-tris(acuoaluminio)](7+)

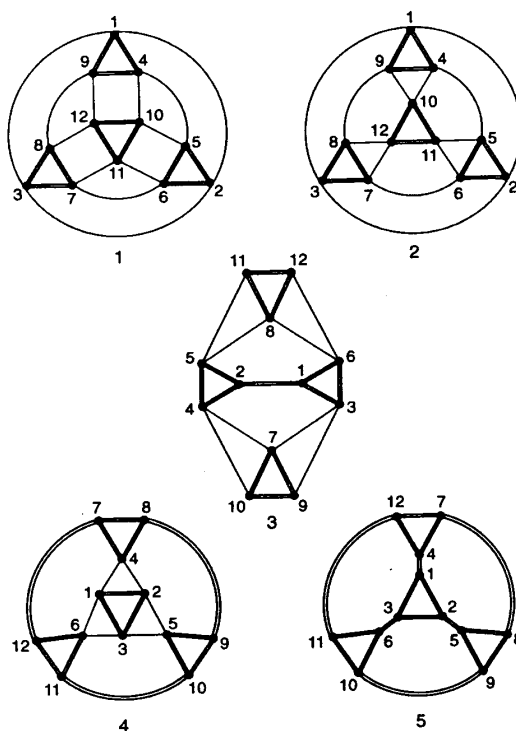


Figura II-1.7. Estructuras bidimensionales abiertas de los isómeros de fórmula $XW_{12}O_{40}$. Los puntos negros son los átomos centrales. Una línea simple entre dos átomos centrales significa un vértice común entre los octaedros. Una línea doble entre ellos significa una arista en común. Los números debajo de las estructuras se refieren al número de isómero en el texto.

La nomenclatura trivial se ha desarrollado en forma anárquica para los politungstatos. Por ejemplo, el metatungstato es un dodecatungstato con la misma estructura que el α - $[SiW_{12}O_{40}]^{4-}$ en la cual dos hidronios están atrapados en la cavidad central en lugar de un átomo de silicio. El politungstato X es el isómero β del metatungstato precedente mientras que el tungstato Y es un decatungstato derivado de la estructura de Lindqvist (ver Sección II-1.3.4)

Ejemplos:

6. $[H_2W_{12}O_{40}]^{6-}$, metatungstato
di- μ_3 -hidroxo-1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-di- μ_3 -oxo-dodeca- μ -oxo.tetrakis[tri- μ -tris(oxotungstato)](6-)
7. $[H_2W_{12}O_{40}]^{6-}$, politungstato X
di- μ_3 -hidroxo-1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-di- μ_3 -oxo-dodeca- μ -oxo.tetrakis[tri- μ -tris(oxotungstato)](6-)

II-1.5.1.2 Compuestos con varios metales de transición, es decir, compuestos sustituidos

Esta clase contiene muchos más compuestos que la precedente. En verdad, el átomo en el entorno tetraédrico puede ser sustituido por uno o varios átomos de tungsteno. Por

ejemplo, las siguientes especies (ignorando la carga) son conocidas con las siguientes sustituciones:

$\text{SiW}_{11}\text{ZO}_{40}$	$Z = \text{Cu}^{\text{II}}, \text{Zn}^{\text{II}}, \text{Mn}^{\text{II}}, \text{Co}^{\text{II}}, \text{Ni}^{\text{II}}, \text{Fe}^{\text{II}}, \text{Mn}^{\text{III}}, \text{Co}^{\text{III}}, \text{Fe}^{\text{III}}, \text{Cr}^{\text{III}}, \text{Al}^{\text{III}}$
$\text{SiW}_{10}\text{Z}_2\text{O}_{40}$ ó $\text{SiW}_{10}\text{ZZ}'\text{O}_{40}$	$Z = \text{Mo}^{\text{VI}}, \text{V}^{\text{V}}, \text{V}^{\text{IV}}$ $Z' = \text{Mo}^{\text{VI}}, \text{V}^{\text{V}}, \text{V}^{\text{IV}}$
$\text{SiW}_9\text{Z}_3\text{O}_{40}$, $\text{SiW}_9\text{Z}_2\text{Z}'\text{O}_{40}$ ó $\text{SiW}_9\text{ZZ}'\text{Z}''\text{O}_{40}$	$Z = Z' = Z'' = \text{Mo}^{\text{VI}}, \text{V}^{\text{V}}, \text{Co}^{\text{II}}, \text{Mn}^{\text{III}}, \text{Fe}^{\text{III}}$

- (a) *Compuestos monosustituidos*. La elección del eje y del plano de referencia está gobernada por las recomendaciones dadas anteriormente y la jerarquía es: (i) la simetría del esqueleto idealizado del polianión; (ii) la posición del átomo sustituyente en la Tabla II-1 con respecto de los otros átomos centrales.

Ejemplos:

1. $[\text{SiMoW}_{11}\text{O}_{40}]^{4-}$, trivialmente referido como α
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo- μ_{12} -
(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(1-molibdendecatungsten)ato(4-)
2. $[\text{SiCoW}_{11}\text{O}_{39}(\text{H}_2\text{O})]^{6-}$, trivialmente denominado como β
1a-acuo-1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-tetracosa- μ -oxo-undeca-
oxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(1-cobaltondecaturtungsten)ato(6-)
3. $[\text{SiNbW}_{11}\text{O}_{40}]^{5-}$, trivialmente referido como α
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo- μ_{12} -
(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(12-niobionundecatungsten)ato(5-)

Para la estructura β es probable que existan tres isómeros. Ellos se designan comúnmente como β_1 , β_2 y β_3 , dependiendo de la posición del átomo sustituido, es decir que si el mismo está localizado en la posición más lejana del grupo rotado, en una posición adyacente al grupo rotado, o en un átomo del grupo rotado, respectivamente.

Ejemplos:

4. $[\text{SiVW}_{11}\text{O}_{40}]^{5-}$, trivialmente referido como β_1
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo-
 μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(undecatungsten-3-vanadion)ato(5-)

En este ejemplo, el eje de referencia es, por supuesto, el eje C_3 que es aquel sobre el que ha girado el grupo M_3O_{13} . El plano esquelético terminal preferencial es el menos condensado, aunque contiene al átomo de vanadio que viene después del tungsteno en la Tabla II-1 [ver Sección II-1.2.4(b)]. El plano de simetría de referencia es elegido para dar los localizadores más bajos al tungsteno de manera tal que el número 3 se asigna al vanadio.

5. $[\text{SiVW}_{11}\text{O}_{40}]^{5-}$, trivialmente referido como β_3
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo-

- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(undecatungsten-12-vanadian)ato(5-)
6. $[\text{SiVW}_{11}\text{O}_{40}]^{5-}$, trivialmente referido como β_2
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.11,6.11,7.12,8.12,9.10-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(undecatungsten-9-vanadian)ato(5-)
Para este compuesto existen formas enantioméricas.

Las recomendaciones pueden ser aplicadas a compuestos más grandes. Por ejemplo $[\text{SiFeW}_{11}\text{O}_{39}(\text{OH})]^{6-}$ puede dimerizarse dando $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}\text{Fe-O-FeSiW}_{11}\text{O}_{39}]^{12-}$, donde cada unidad tiene simetría T_d .

Ejemplo:

7. $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}\text{FeOFeSiW}_{11}\text{O}_{39}]^{12-}$
1a- μ -oxo-bis[1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-tetracosa- μ -oxo-undecaoxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-(1-ferrundecatungsten)]ato(12-)

(b) *Compuestos di- y polisustituídos.* El sistema de numeración suministra una solución al problema de distinguir isómeros de los compuestos di- y poli-sustituídos. Por ejemplo, el $[\text{PMo}_{10}\text{V}_2\text{O}_{40}]^{5-}$ tiene cinco isómeros. Debido a su posición en la Tabla II-1, un átomo de vanadio debe asignarse al localizante 12 en el entorno del metal con simetría T_d . Los isómeros ahora se distinguen por los números de localizantes del vanadio:

12 y 11 12 y 8 12 y 7 12 y 3 12 y 2.

Se ha preparado un compuesto trisustituído que contiene dos átomos de molibdeno y uno de vanadio. El localizante 1 es dado al átomo que aparece primero en la Tabla II-1, en este caso molibdeno, y un número localizante tan alto como sea posible al átomo que aparece al final, es decir al vanadio.

Ejemplo:

8. $[\text{SiMo}_2\text{VW}_9\text{O}_{40}]^{5-}$
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo- μ_{12} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-[1,2-dimolebdin(VI)(nonatungsten(VI))-3-vanadian(V)]ato(5-)

II-1.5.1.3 Sustitución de un ligando

Cuando se sustituye un ligando, se puede aplicar el mismo procedimiento usando los designadores localizantes. Los aniones $[\text{HW}_{12}\text{F}_2\text{O}_{38}]^{5-}$, $[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{F}_2\text{O}_{38}]^{4-}$ y $[\text{HW}_{12}\text{F}_3\text{O}_{37}]^{4-}$ son ejemplos donde, en cada caso, los hidronios son atrapados en la cavidad central y donde los átomos de flúor siempre puentean tres átomos de tungsteno.

Ejemplo:

1. $[\text{HW}_{12}\text{F}_2\text{O}_{38}]^{5-}$

μ_3 -fluoro- μ_3 -(fluorohidrógeno)-1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-
-di- μ_3 -oxo-tetrakis[tri- μ -oxo-tris(oxotungstato)](5-)

II-1.5.1.4 Compuestos reducidos

Un compuesto reducido se trata de la misma forma que un compuesto sustituido si los electrones añadidos están localizados. Sin embargo, en muchos casos, el proceso de salteado hace imposible la localización. Entonces sólo cambia la carga total.

Ejemplos:

1. $[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$ puede ser reducido por cuatro electrones para dar $[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]^{8-}$
1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-dodeca- μ -oxo- μ_{12} -
(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-tetrakis(tri- μ -oxo-tris(oxomolibdato)](8-)
2. Cuando los electrones se agregan al $[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$, para producir el $[\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}]^{6-}$
doblemente reducido, se supone que ellos están localizados en dos átomos de Mo.

Esto también se asume en el $[\text{SiMo}_2\text{W}_{10}\text{O}_{40}]^{6-}$:

1.4,1.9,2.5,2.6,3.7,3.8,4.10,5.10,6.11,7.11,8.12,9.12-tetracosa- μ -oxo-dodecaoxo- μ_{12} -
(tetraoxosilicato- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}, O^{10.11.12}$)-[1,2-dimolebdin(V)decatungsten(VI)]ato(6-)

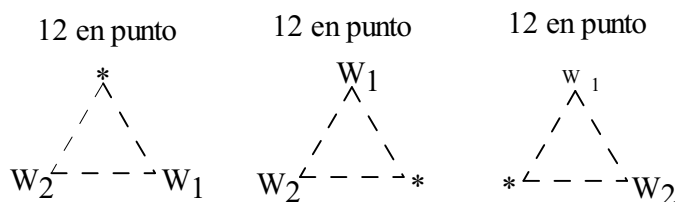
II-1.5.2 Compuestos en los cuales faltan los átomos centrales (estructuras defectuosas)

Se han preparado varios polianiones que pueden ser descritos a partir de las estructuras de Keggin por remoción de átomos de tungsteno y sus átomos de oxígeno asociados que no forman puente.

II-1.5.2.1 Compuestos con una vacancia

Para numerar los átomos centrales, se usan las recomendaciones dadas anteriormente: el plano esquelético superior es el plano con el menor número de átomos centrales, es decir aquel con la posición vacante, y con el octaedro menos condensado.

Aquí pueden darse varias posibilidades porque hay tres maneras de localizar la posición vacante con respecto a la posición horaria 12 en punto. Las tres posibilidades con el plano esquelético superior consistente sólo de átomos de tungsteno se representan en el siguiente diagrama que muestra el plano esquelético superior.



El asterisco representa el sitio vacante. La regla para localizar la vacancia es: "el sitio vacante es considerado como una posición atómica y luego es numerada; a ella se le asigna el menor número posible". Entonces la elección es:

12 en punto

*Ejemplos:*

1. $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}]^{8-}$ (derivado de la estructura de Keggin)
1c.2b,1d.4a,1e.5a,2d.6a,2e.7a,3c.4b,3d.8e,3f.9b,4e.5d,4f.9c,5c.6b,5f.10b,6e.7d,6f.10c,
7c.8b,7f.11b,8f.11c,9f.10d,9d.11f,10f.11d-icosa- μ -oxo-pentadeca-oxo- μ_{11} -(tetraoxosilicato- $O^{1.4.5}$, $O^{2.6.7}$, $O^{3.8}$, $O^{9.10.11}$)-undecatungstato(8-)

Del isómero C_{3v} derivado de la estructura de Keggin, se pueden obtener tres isómeros por remoción de un átomo central. La elección del eje de referencia tiene preferencia respecto de cualquier otra elección, en este caso es donde sea que esté la vacancia.

En el ejemplo siguiente, el átomo central se quita del grupo rotado M_3O_{13} .

2. $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}]^{8-}$
1c.2a,1e.4a,1f.5a,2e.6a,2f.7a,3e.4d,3b.8c,3f.9c,4c.5b,4f.10b,5e.6d,5f.10b,6c.7b,6f.11b,
7e.8d,7f.11c,8f.9b,9e.10d,9d.11e,10e.11d-icosa- μ -oxo-pentadeca-oxo- μ_{11} -(tetraoxosilicato- $O^{1.2}$, $O^{3.8.9}$, $O^{4.5.10}$, $O^{6.7.11}$)-undecatungstato(8-)

En el siguiente ejemplo, el átomo central es removido del plano que contiene seis átomos centrales. Siguiendo la regla anterior, la posición 12 en punto se define con la posición vacante. Hay dos isómeros ópticos de esta estructura. Como es de práctica general, ellos poseen el mismo nombre; la numeración indica quiralidad horaria o antihoraria, dependiendo del isómero en consideración.

3. $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}]^{8-}$
1b.3c,1c.2b,1d.8a,2c.3b,2d.4a,2e.5a,3d.6a,3e.7a,4e.5d,4f.10b,5c.6b,5f.10c,6e.7d,
6f.11b,7c.8b,7f.11c,8f.9b,9d.11f,9f.10d,10f.11d-icosa- μ -oxo-pentadeca-oxo- μ_{11} -
-(tetraoxosilicato- $O^{1.8}$, $O^{2.4.5}$, $O^{3.6.7}$, $O^{9.10.11}$)-undecatungstato(8-)

En este ejemplo, el átomo central es removido del plano opuesto al plano del grupo rotado.

4. $[\text{SiW}_{11}\text{O}_{39}]^{8-}$
1c.2b,1d.4a,1e.5a,2d.6a,2e.7a,3c.4b,3d.8e,3f.9c,4e.5d,4f.10b,5c.6b,5f.10c,6e.7d,
6f.11b,7c.8b,7f.11c,8f.9b,9f.10d,10f.11d,9d.11f-icosa- μ -oxo-pentadeca-oxo- μ_{11} -
-(tetraoxosilicato- $O^{1.4.5}$, $O^{2.6.7}$, $O^{3.8}$, $O^{9.10.11}$)-undecatungstato(8-)

II-1.5.2.2 Compuestos con tres vacancias

Se conocen dos tipos: en el primero, un grupo W_3O_{13} completo ha sido removido (trivialmente llamado de tipo B) mientras que en el segundo, tres átomos metálicos adyacentes pertenecientes a tres grupos W_3O_{13} diferentes han sido removidos (trivialmente llamado de tipo A). En cada caso un grupo M_3O_{13} remanente puede ser rotado por 60° .

Ejemplos:

1. $[\text{PMo}_9\text{O}_{28}(\text{OH})_6]^{3-}$, tipo A derivado de la estructura de Keggin T_d (Figura II-1.8,I) 4f,5f,6f,7f,8f,9f-exahidroxo-1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6^a,3e.7a,3f.8a,4c.5b,4d.9e,5e.6d,6b.7b,7e.8d,8c.9b-pentadeca- μ -oxo- μ_9 -[tetraoxofosfato(V)- $O^{1.2.3}, O^{4.5}, O^{6.7}, O^{8.9}$]-nonakis(oxomolibdato)(3-)
2. $[\text{As}^{\text{III}}\text{Mo}_9\text{O}_{33}]^{9-}$, tipo B derivado de la estructura de Keggin C_{3v} (Figura II-1.8,II) 1c.2a,1d.3a,2d.3c,2b.4b,2f.7b,3e.5a,3f.8a,4e.6c,4f.7c,5e.8c,5f.9c,6f.7e,6d.9d,7d.8d,8f.9e-pentadeca- μ -oxopentadeca-oxo- μ_9 -[trioxoarsenato(III)- $O^{1.2.3}, O^{4.6.7}, O^{5.8.9}$]-nonamolibdato(9-). Hasta el presente este isómero no es conocido.
3. $[\text{As}^{\text{III}}\text{W}_9\text{O}_{33}]^{9-}$, tipo B derivado de la estructura de Keggin T_d (Figura II-1.8,III) 1c.2b,1b.3c,1e.4a,1d.9a,2c.3b,2d.5a,2d.6a,3d.7a,3e.8a,4c.5d,4d.9e,5e.6d,6c.7b,7e.8d,8c.9b-pentadeca- μ -oxo-pentadeca-oxo- μ_9 -[trioxoarsenato(III)- $O^{1.4.9}, O^{2.5.6}, O^{3.7.8}$]-nonatungstato(9-)
4. $[\text{SiW}_9\text{O}_{34}]^{10-}$, tipo A derivado de la estructura de Keggin C_{3v} (Figura II-1.8,IV) 1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,4e.5d,4b.9c,5c.6b,6e.7d,7c.8b,8e.9d-pentadeca- μ -pentadeca-oxo- μ_9 -[tetraoxosilicato- $O^{1.2.3}, O^{4.9}, O^{5.6}, O^{7.8}$]-nonatungstato(10-)

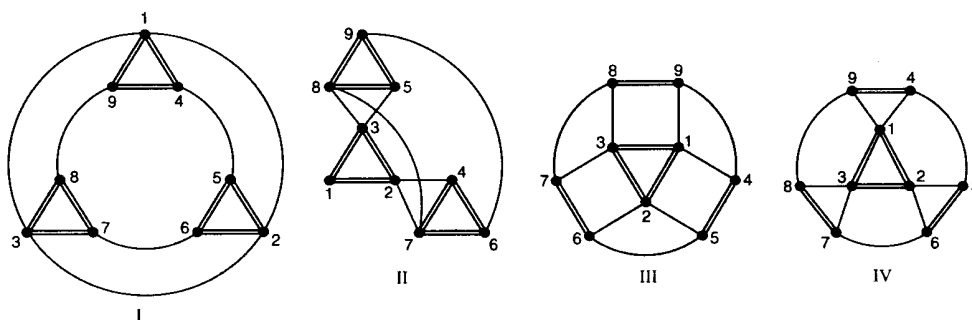


Figura II-1.8. Estructuras abiertas bidimensionales con fórmula XM_9O_n . Los puntos oscuros son los átomos centrales. Una línea simple indica los vértices octaédricos compartidos. Una línea doble corresponde a una arista compartida del octaedro.

II-1.6 POLIANIONES CON 18 ÁTOMOS CENTRALES

Otra clase de polianiones contiene dieciocho átomos centrales. La estructura básica se conoce con la denominación de estructura de Dawson. Ella posee simetría D_{3h} (Figura II-1.9). Ejemplos representativos son $[\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$, $[\text{P}_2\text{Mo}_{10}\text{O}_{62}]^{6-}$, $[\text{As}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$, y $[\text{As}_2\text{Mo}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$.

Estos compuestos son dímeros del XM_9 , ambos derivados de la estructura de Keggin XM_{12} . Tres átomos de tungsteno son removidos, cada uno de un grupo M_3O_{13} diferente. Las unidades XM_9 están unidas entre ellas por coparticipación de los vértices octaédricos. El tetraedro interno XO_4 posee un plano basal hacia el lado abierto de la mitad XW_9 .

El compuesto X_2M_{18} puede ser nombrado como una unidad completa usando las recomendaciones dadas anteriormente. El plano esquelético superior está en un grupo M_3O_{13} . Como hay dos planos terminales idénticos, el superior y/o el más bajo, y como tal grupo puede ser rotado 60° , pueden existir tres isómeros; entre ellos, dos son conocidos:

Isómero 1	Isómero 2	Isómero 3
plano esquelatal superior no rotado; plano esquelatal inferior no rotado	plano esquelatal superior no rotado; plano esquelatal inferior rotado	plano esquelatal superior rotado; plano esquelatal inferior rotado

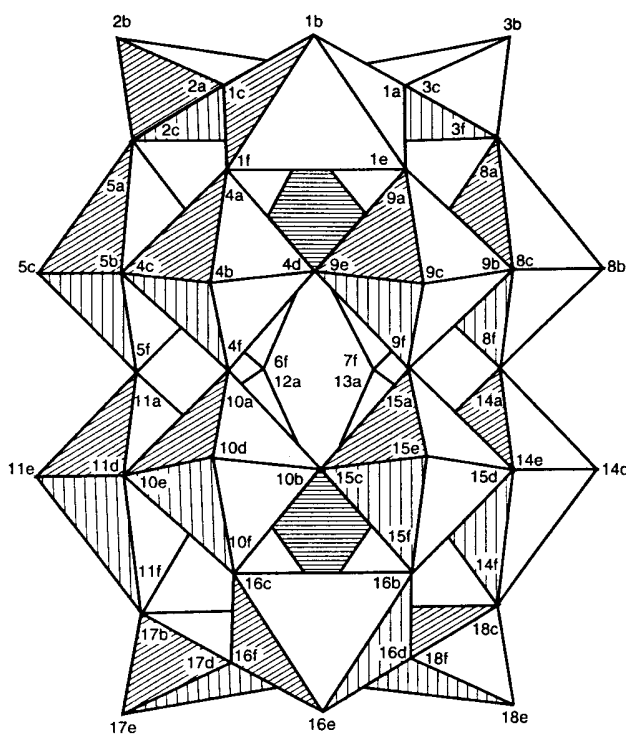


Figura II-1.9. Arreglo del octaedro y los designadores localizantes para el ión $X_2M_{18}O_{62}$ compuesto de dos subunidades XM_9 .

Para estos tres casos, las secuencias de localizantes de los puentes μ -oxo son como siguen:

Isómero 1: 1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,**4c.5b**,4d.9e,4f.10a,5e.6d,5f.11a,6c.7b,6f.12a,7e.8d,7f.13a,8c.9b,8f.14a,9f.15a,10e.11d,10b.15c,10f.16c,11c.12b,11f.17b,12e.13d,12f.17c,13c.14b,13f.18b,14e.15d,16f.18c,15f.16b,16f.17d,16d.18f,17f.18d.

Isómero 2: 1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,**4e.5d**,4b.9c,4f.10a,5c.6b,5f.11a,6e.7d,6f.12a,7c.8b,7f.13a,8e.9d,8f.14a,9f.15a,10c.11b,10d.15e,10f.16b,11e.12d,11f.16c,12c.13b,12f.17b,13e.14d,13f.17c,14c.15b,14f.18b,15f.18c,16f.17d,16d.18f,17f.18d.

Isómero 3: 1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,**4e.5d**,4b.9c,4f.10^a,5c.6b,5f.11a,6e.7d,6f.12a,7c.8b,7f.13a,8e.9d,8f.14a,9f.15a,10c.11b,10d.15e,10f.16c,11e.12d,11d.17b,12c.13b,12f.17c,13e.14d,13f.18b,14c.15b,14f.18c,15f.16b,16f.17d,16d.18f,17f.18d.

Los localizantes en **negrita** son: el primero, para distinguir a los isómeros 2 y 3 del isómero 1; los localizantes subrayados son: el primero, para distinguir al isómero 3 y al isómero 1 del isómero 2.

Ejemplos:

1. $[P_2W_{18}O_{62}]^{6-}$ (isómero 1)
 1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,4c.5b,4d.9e,4f.10a,5e.6d,5f.11a,6c.7b,6f.12a,7e.8d,7f.13a,8c.9b,8f.14a,9f.15a,10e.11d,10b.15c,10f.16c,11c.12b,11f.17b,12e.13d,12f.17c,13c.14b,13f.18b,14e.15d,16f.18c,15f.16b,16f.17d,16d.18f,17f.18d-exatriaconta- μ -**oxo- μ_9** -(tetraoxofosfato- $O^{1.2.3}$, $O^{4.5}$, $O^{6.7}$, $O^{8.9}$)- μ_9 -(tetraoxofosfato- $O^{10.11}$, $O^{12.13}$, $O^{14.15}$, $O^{16.17.18}$)-octadecakis(oxotungstato)(6-)

Para tener nombres más compactos, los prefijos multiplicativos se pueden usar cuando el polianión es simétrico. Debe destacarse que, como el polianión tiene un plano de simetría perpendicular al eje de referencia, la numeración es válida sólo para la primera mitad.

2. $[P_2W_{18}O_{62}]^{6-}$ (isómero 1)
 4.10,5.11,6.12,7.13,8.14,9.15-exa- μ -oxo-bis[1c.2a,1a.3c,1f.4a,1e.9a,2c.3a,2e.5a,2f.6a,3e.7a,3f.8a,4c.5b,4d.9e,5e.6d,6c.7b,7e.8d,8c.9b-pentadeca- μ -oxo- μ_9 -(tetraoxofosfato- $O^{1.2.3}$, $O^{4.5}$, $O^{6.7}$, $O^{8.9}$)-nonakis(oxotungstato)](6-)

II-1.7 CONCLUSIÓN

Los nombres dados a los polianiones son complicados y conllevan una larga secuencia de números y letras. Sin embargo, los nombres surgen de la complejidad estructural de los mismos polianiones. De tal manera, su empleo en el quehacer cotidiano puede llegar a ser tedioso y si se desea emplear nombres más cortos, es posible consultar el Capítulo I-9 sobre "Oxoácidos y Aniones Derivados" en la Nota 1a. El presente Capítulo suministra un método para nombrar un oxoanión de una dada fórmula pero con una estructura desconocida. Comúnmente es aceptado que un nombre abreviado se puede utilizar, en tanto esté claramente definido desde el comienzo y el nombre completamente sistemático será dado *in extenso* en el punto apropiado del texto.

Los nombres dados en este Capítulo poseen el mérito de ser sistemáticos. Las recomendaciones tienen la intención de tratar todos los posibles desarrollos en esta área.

II-2 COMPUESTOS INORGÁNICOS MODIFICADOS ISOTÓPICAMENTE

CONTENIDOS

- II-2.1 Introducción
- II-2.2 Clasificación y simbolismo
 - II-2.2.1 Compuestos isotópicamente no modificados
 - II-2.2.2 Compuestos isotópicamente modificados
 - II-2.2.3. Símbolos de los núclidos
 - II-2.2.4 Nombres para los átomos de hidrógeno, iones o grupos
 - II-2.2.5 Orden de los símbolos de núclidos
- II-2.3 Compuestos isotópicamente sustituidos
 - II-2.3.1 Definición de compuestos isotópicamente sustituidos
 - II-2.3.2 Fórmulas de compuestos isotópicamente sustituidos
 - II-2.3.3 Nombres de compuestos isotópicamente sustituidos
- II-2.4 Compuestos isotópicamente etiquetados
 - II-2.4.1 Definición de compuestos isotópicamente etiquetados
 - II-2.4.2 Compuestos isotópicamente etiquetados
 - II-2.4.2.1 Definición de compuestos específicamente etiquetados
 - II-2.4.2.2 Fórmulas de compuestos específicamente etiquetados
 - II-2.4.2.3 Nombres de compuestos específicamente etiquetados
 - II-2.4.2.4 Tipos de compuestos específicamente etiquetados
 - II-2.4.3 Compuestos selectivamente etiquetados
 - II-2.4.3.1 Definición de compuestos selectivamente etiquetados
 - II-2.4.3.2 Fórmulas de compuestos selectivamente etiquetados
 - II-2.4.3.3 Nombres de compuestos selectivamente etiquetados
 - II-2.4.3.4 Indicación del número de núclidos etiquetados
 - II-2.4.3.5 Etiquetamiento general
 - II-2.4.3.6 Etiquetamiento uniforme
 - II-2.4.4 Compuestos etiquetados no selectivamente
 - II-2.4.4.1 Definición de compuestos etiquetados no selectivamente
 - II-2.4.4.2 Materiales no moleculares isotópicamente etiquetados
 - II-2.4.5 Compuestos isotópicamente deficientes
- II-2.5 Localizantes y numeración de compuestos isotópicamente modificados
 - II-2.5.1 Indicación de la posición de las modificaciones isotópicas
 - II-2.5.2 Prioridad
 - II-2.5.3 Numeración
 - II-2.5.4 Símbolos y prefijos grupales
 - II-2.5.5 Símbolos de núclidos destacados
- II-2.6 Sumario de tipos de compuestos isotópicamente modificados

II-2.1 INTRODUCCIÓN

Estas recomendaciones suministran un sistema general de nomenclatura de compuestos inorgánicos cuya composición isotópica de los núclidos (Nota 2a) se desvía de la que ocurre en la Naturaleza (Nota 2b). (En estas recomendaciones, el término compuesto incluye a los iones, radicales, y otras especies). Ellas también son apropiadas para designar especies moleculares isotópicas individuales. Un residuo orgánico modificado isotópicamente que forma parte de un compuesto orgánico, tal como un ligando orgánico en una entidad de coordinación, se denomina de acuerdo a las recomendaciones dadas en la Nomenclatura de Química Orgánica, Compuestos Isotópicamente Modificados (Nota 2c).

II-2.2 CLASIFICACIÓN Y SIMBOLISMO

II-2.2.1 Compuestos isotópicamente no modificados

Un compuesto isotópicamente no modificado tiene una composición macroscópica tal que sus núclidos constituyentes están presentes en la proporción que tiene lugar en la Naturaleza. Su fórmula y nombre están escritos de acuerdo a las recomendaciones de la IUPAC (Nota 2d). El nombre de un compuesto isotópicamente no modificado no requiere alteración a menos que se desee contrastar el compuesto natural con el compuesto isotópicamente modificado o enfatizar su carácter natural o normal.

Ejemplos:

NH ₃	Amoníaco
Na ₂ CO ₃	carbonato de sodio
HNO ₃	ácido nítrico
K[AgF ₄]	tetrafluoroargentato de potasio
PH ₃	fosfina no modificada o fosfina (ver Nota 2d)
I ₂ O ₅	pentóxido de diiodo no modificado

II-2.2.2 Compuestos isotópicamente modificados (Nota 2e)

Un compuesto isotópicamente modificado tiene una composición macroscópica tal que la relación de los núclidos para al menos un elemento se desvía significativamente de aquella que ocurre en la Naturaleza.

Los compuestos isotópicamente modificados pueden ser clasificados en dos grandes categorías: compuestos isotópicamente sustituidos (ver Sección II-2.3) y compuestos isotópicamente etiquetados (ver Sección II-2.4).

Nota 2a : *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, 2nd Edition, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993.

Nota 2b : Para la discusión del significado de la composición natural ver Atomic Weights of the Elements 1979, *Pure Appl. Chem.*, **52**, 2349 (1980).

Nota 2c : *Nomenclature of Organic Chemistry*, 1979 Edition, Pergamon Press, Oxford, Section H.

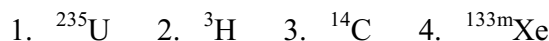
Nota 2d : *Nomenclature of Inorganic Chemistry. Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.

Nota 2e : En la Sección II-2.6 se brinda un resumen de los diversos tipos de modificaciones isotópicas.

II-2.2.3 Símbolos de los núclidos

El símbolo para denotar un núclido en una fórmula o nombre de un compuesto isotópicamente modificado consiste del símbolo atómico del elemento y un número arábigo en la posición izquierda superior que indica el número másico del núclido (Nota 2d). Un núclido metaestable se indica por agregado de la letra m (impresa en tipo romano) al número másico del núclido.

Ejemplos:



Los símbolos atómicos usados en los símbolos de los núclidos son aquellos dados en la referencia de la Nota 2d. En el símbolo del núclido, el símbolo atómico también se imprime en tipo romano. Para los isótopos de hidrógeno, protio, deuterio y tritio, se emplean los símbolos de los núclidos ${}^1\text{H}$, ${}^2\text{H}$ y ${}^3\text{H}$, respectivamente. Los símbolos D y T se pueden usar para ${}^2\text{H}$ y ${}^3\text{H}$, respectivamente, pero no cuando los otros núclidos etiquetados también están presentes porque esto puede causar dificultades en el ordenamiento alfabético de los símbolos de los núclidos en el descriptor isotópico.

II-2.2.4 Nombres para los átomos de hidrógeno, iones y grupos

Estos nombres comprenden nombres generales, que se usan sin mención de la masa nuclear de la entidad hidrógeno, tanto para el hidrógeno en su abundancia isotópica natural o donde no es deseable distinguir entre los isótopos, y nombres específicos vinculados a los núclidos (Tabla II-2.1).

	General	${}^1\text{H}$	${}^2\text{H}$ ó D	${}^3\text{H}$ ó T
Átomo (H)	Hidrógeno	protio	deuterio	tritio
Catión (H^+) (Nota 2f)	Hidrón	protón	deuteron	tritón
Anión (H^-)	Hidruro	prótido	deutérido	trítido
Grupo (-H)	Hidrido hidro (en compuestos de boro)	protio	deutero	trito

Tabla II-2.1 Nombres de los átomos, iones o grupos de hidrógeno

II-2.2.5 Orden los símbolos de los núclidos

Cuando es necesario citar diferentes núclidos en el mismo lugar en la fórmula o nombre de un compuesto isotópicamente modificado, los símbolos de los núclidos se escriben en orden alfabético de acuerdo a sus símbolos atómicos. Cuando sus símbolos atómicos son idénticos se escriben en orden de número másico creciente. Los símbolos atómicos, con sus localizantes, si hay alguno, se separan uno de otro por una coma.

Nota 2f : Protón, deuterón y tritón se los nombres de las partículas en física nuclear y química nuclear y sus Símbolos son p, d y t, respectivamente (ver Nota 2a, p.43).

II-2.3 COMPUESTOS ISOTÓPICAMENTE SUSTITUIDOS

II-2.3.1 Definición de compuestos isotópicamente sustituidos

Un compuesto isotópicamente sustituido tiene una composición que posee esencialmente todas las moléculas del compuesto sólo con los núclido(s) indicado(s) en cada posición designada. Para todas las otras posiciones la ausencia de la indicación del núclido significa que la composición del núclido es la natural.

II-2.3.2 Fórmulas de los compuestos isotópicamente sustituidos

La fórmula de un compuesto isotópicamente sustituido se escribe como es usual, excepto que se usan los símbolos apropiados de los núclidos. Cuando están presentes núclidos diferentes del mismo elemento en la misma posición, sus símbolos deberían escribirse en orden de número másico creciente (ver también Sección II-2.2.5).

II-2.3.3 Nombres de los compuestos isotópicamente sustituidos

El nombre de un compuesto isotópicamente sustituido se forma insertando entre paréntesis el símbolo(s) apropiado del núclido, precedido por cualquier localizante(s) necesario (letras y/o numerales) antes del nombre, o, preferentemente, antes del nombre para esa parte del compuesto que está isotópicamente sustituido. Inmediatamente después del paréntesis sin dejar espacio ni agregar guión, excepto cuando el nombre o una parte del mismo incluye un localizante precedente, en cuyo caso se debe agregar el guión (ver ^{Nota 2g} Nota 2g).

Cuando es posible la polisustitución, el número de átomos que han sido sustituidos siempre se especifica con un subíndice derecho ligado al símbolo(s) atómico aún en el caso de la monosustitución.

Cuando deben ser citados diferentes núclidos en el mismo lugar en el nombre de un compuesto isotópicamente sustituido, los símbolos de los núclidos se ordenan como fuera indicado en la Sección II-2.2.5.

Ejemplos:

<i>Compuesto no modificado isotópicamente</i>	<i>Compuesto modificado Isotópicamente</i>
H ₂ O Agua	H ³ HO (³ H ₁)agua
Br ₂ dibromo	⁷⁸ Br ⁸¹ Br (⁷⁸ Br, ⁸¹ Br)dibromo
H ₂ SO ₄ Ácido sulfúrico	² H ₂ ³⁵ SO ₄ (² H ₂ , ³⁵ S)ácido sulfúrico
NaCl cloruro de sodio	Na ³⁶ Cl (³⁶ Cl) cloruro de sodio
UF ₆ exafluoruro de uranio fluoruro de uranio(VI)	²³⁵ UF ₆ exafluoruro de (²³⁵ U)uranio fluoruro de (²³⁵ U)uranio(VI)

Nota 2g : Todos los nombres recomendados por IUPAC pueden ser usados (ver Nota 2d). En los ejemplos usualmente se menciona sólo uno

<i>Compuesto no Modificado isotópicamente</i>	<i>Compuesto modificado Isotópicamente</i>
InCl ₃ tricloruro de indio cloruro de indio(III) cloruro de indio(3+)	^{113m} InCl ₃ tricloruro de (^{113m} In)indio cloruro de (^{113m} In)indio(III) cloruro de (^{113m} In)indio(3+)
SiH ₄ Silano	SiH ₃ ² H (² H ₁)silano
SiH ₃ -SiHCl-SiH ₃ 2-clorotrisilano	SiH ₂ ² H-SiH ₂ ³⁶ Cl-SiH ₃ 1 2 3 2-[(³⁶ Cl)cloro](1- ² H ₁)trisilano (para numeración ver Sección II-2.5.3)
N ₂ O monóxido de dinitrógeno	¹⁵ N ₂ O monóxido de di[(¹⁵ N)nitrógeno]
KNaCO ₃ carbonato de potasio y sodio	⁴² KNa ¹⁴ CO ₃ (¹⁴ C)carbonato de (⁴² K)potasio y sodio
Ca ₃ (PO ₄) ₂ bis(fosfato) de tricalcio	Ca ₃ (³² PPO ₄) ₂ bis[(³² P)fosfato] de tricalcio
K[PF ₆] exafluorofosfato de potasio	K[³² PF ₆] exafluoro(³² P)fosfato de potasio
[Cr(H ₂ O) ₆]Cl ₃ tricloruro de exaacuocromo	[⁵⁰ Cr(² H ₂ O) ₆]Cl ₃ tricloruro de exa[(² H ₂)acuó](⁵⁰ Cr)cromo

Para retener el mismo nombre para un compuesto isotópicamente modificado que para el correspondiente compuesto no modificado tanto como sea posible, puede colocarse un descriptor isotópico antes que un prefijo numérico.

Ejemplos:

BCl ₃ tricloruro de boro tricloroborano	B ³⁵ Cl ³⁷ Cl ₂ (³⁵ Cl, ³⁷ Cl ₂)tricloruro de boro (³⁵ Cl, ³⁷ Cl ₂)tricloroborano
K ₄ [Fe(CN) ₆] exacianoferrato de tetrapotasio	K ₃ ⁴² K[Fe(CN) ₆] exacianoferrato de (⁴² K ₁)tetrapotasio

II-2.4 COMPUESTOS MARCADOS ISOTÓPICAMENTE

II-2.4.1 Definición de compuestos isotópicamente etiquetados

Un compuesto isotópicamente etiquetado puede ser considerado formalmente como una mezcla de un compuesto isotópicamente no modificado y uno o más compuestos análogos isotópicamente sustituidos (Nota 2h).

Nota 2h : Aunque un compuesto isotópicamente etiquetado es realmente una mezcla, tanto como se refiera a la identidad química (de la misma manera como en un compuesto no modificado), a los fines de la nomenclatura tal mezcla se denomina un compuesto isotópicamente etiquetado

Los compuestos isotópicamente etiquetados pueden ser de varios tipos, tales como:

- (a) específicamente etiquetado (ver Sección II-2.4.2);
- (b) selectivamente etiquetado (ver Sección II-2.4.3);
- (c) no selectivamente etiquetado (ver Sección II-2.4.4); y
- (d) isotópicamente deficiente (ver Sección II-2.4.5).

II-2.4.2 Compuestos específicamente etiquetados

II-2.4.2.1 Definición de compuestos específicamente etiquetados

Un compuesto isotópicamente etiquetado se denomina específicamente etiquetado cuando un compuesto isotópicamente sustituido se adiciona formalmente al análogo isotópicamente no modificado. En tal caso, tanto la posición(es) y el número de cada núclido etiquetado son definidos (Nota 2i).

II-2.4.2.2 Fórmulas de compuestos específicamente etiquetados

La fórmula de un compuesto específicamente etiquetado se escribe en la forma habitual, pero con el símbolo del núclido(s) y el subíndice multiplicativo apropiados, si hay alguno, encerrados entre corchetes cuadrados. Cuando los núclidos diferentes del mismo elemento están presentes en el mismo lugar, los símbolos de los núclidos se ordenan de acuerdo a lo indicado en la Sección II-2.2.5 (Nota 2j).

Ejemplos:

<i>Compuesto isotópicamente sustituido</i>	<i>cuando se agrega a</i>	<i>compuesto isotópicamente no modificado</i>	<i>resulta en</i>	<i>compuesto específicamente etiquetado</i>
H^{36}Cl		HCl		$\text{H}[\text{}^{36}\text{Cl}]$
$\text{H}^{99\text{m}}\text{TcO}_4$		HTcO_4		$\text{H}[\text{}^{99\text{m}}\text{Tc}]\text{O}_4$
$\text{Ge}^2\text{H}_2\text{F}_2$		GeH_2F_2		$\text{Ge}[\text{}^2\text{H}_2]\text{F}_2$
${}^{32}\text{P}\text{Cl}_3$		PCl_3		$[\text{}^{32}\text{P}]\text{Cl}_3$

II-2.4.2.3 Nombres de compuestos específicamente etiquetados

El nombre de un compuesto específicamente etiquetado se forma por inserción entre corchetes cuadrados del símbolo(s) del núclido, precedido por el localizante necesario(s) (letras y/o numerales), antes del nombre o preferiblemente el nombre para aquella parte del compuesto que está isotópicamente modificado. Inmediatamente antes del corchete cuadrado no hay espacio ni guión excepto cuando el nombre, o una parte del nombre, requiere un localizante precedente se inserta un guión (ver Nota 2g).

Nota 2i : Cuando ocurre un intercambio libre entre los átomos de igual elemento en un compuesto, por ejemplo, H en NH_3 y en H_2NNH_2 cuando está en contacto con el medio acuoso, el etiquetado específico no es posible y tales compuestos isotópicamente etiquetados debe ser considerado como selectiva o no selectivamente (ver Secciones II-2.4.3 y II-2.4.4).

Nota 2j : Aunque la fórmula para un compuesto específicamente etiquetado no representa la composición del material masivo, el cual consite abrumadoramente del compuesto isotópicamente no modificado, ello no indica la presencia del compuesto de interés principal, el compuesto isotópicamente etiquetado.

Cuando es posible etiquetar uno o más átomos del mismo elemento, el número de átomos que han sido etiquetados siempre es especificado como un superíndice derecho en el símbolo(s) atómico aún cuando sólo uno es etiquetado. Esto es necesario a los fines de distinguir entre un compuesto específicamente etiquetado y otro selectiva o no selectivamente etiquetado.

Cuando deben ser citados diferentes núclidos en el mismo lugar en el nombre de un compuesto específicamente etiquetado, los símbolos de los núclidos se ordenan en la forma indicada en la Sección II-2.2.5.

El nombre de un compuesto específicamente etiquetado difiere de aquel que corresponde al compuesto isotópicamente sustituido (ver Sección II-2.3.3) sólo en el uso de los corchetes cuadrados en vez de los paréntesis encerrando al descriptor del núclido.

Ejemplos:

<i>Compuesto isotópicamente no modificado</i>	<i>Compuesto específicamente etiquetado</i>
HCl	H[³⁶ Cl]
cloruro de hidrógeno	[³⁶ Cl]cloruro de hidrógeno
HTcO ₄	H[^{99m} Tc]O ₄
tetraoxotecnato(1-) de hidrógeno	tetraoxo[^{99m} Tc]tecnato(1-) de hidrógeno
PCl ₃	[³² P]Cl ₃
tricloruro de fósforo	tricloruro de [³² P]fósforo
Na ₂ S ₂ O ₃	Na ₂ [³⁵ S]O ₃ S
tiosulfato de sodio	tio[³⁵ S]sulfato de sodio
Na ₂ S ₂ O ₃	Na ₂ SO ₃ [³⁵ S]
tiosulfato de sodio	([³⁵ S]tio)sulfato de sodio
NH ₃	[¹⁵ N]H ₂ [² H]
Amoníaco	[² H ₁ , ¹⁵ N]amoníaco
GeH ₂ F ₂	Ge[² H ₂]F ₂
Difluorogermano	difluoro[² H ₂]germano

II-2.4.2.4 Tipos de compuesto específicamente etiquetados

Un compuesto específicamente etiquetado es:

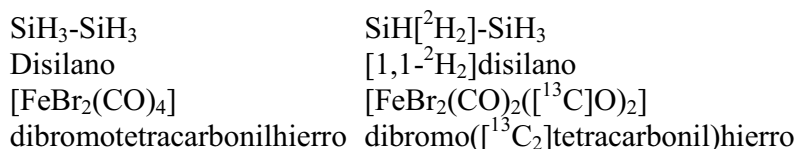
- (a) Simplemente etiquetado cuando el compuesto isotópicamente sustituido tiene sólo un átomo isotópicamente modificado.

Ejemplos:

<i>Compuesto no modificado isotópicamente</i>	<i>Compuesto específicamente etiquetado</i>
H ₂ O ₂	HO[¹⁸ O]H
peróxido de hidrógeno	[¹⁸ O ₁]peróxido de hidrógeno
H ₂ NNH ₂	H ² [¹⁵ N]NH ₂
Hidrazina	[¹⁵ N ₁]hidrazina
[Cr(NH ₃) ₆]Cl ₃	[[⁵⁵ Cr](NH ₃) ₆]Cl ₃
tricloruro de examincromo	tricloruro de examin[⁵⁵ Cr]cromo

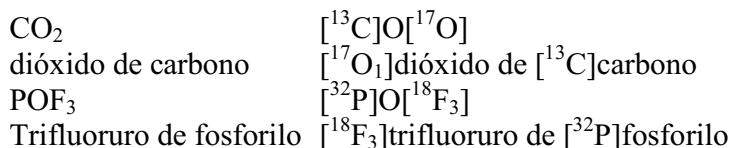
- (b) Múltiplemente etiquetado cuando el compuesto isotópicamente sustituido tiene más de un átomo modificado del mismo elemento en la misma posición, o en diferentes posiciones.

Ejemplos:



- (c) Etiquetados mixtos cuando el compuesto isotópicamente sustituido tiene más de una clase de átomo modificado.

Ejemplos:



II-2-4-3 Compuestos selectivamente etiquetado

II-2.4.3.1 Definición de compuestos selectivamente etiquetados

Un compuesto isotópicamente etiquetado se denomina selectivamente etiquetado cuando una mezcla de compuestos isotópicamente sustituidos es formalmente agregado al compuesto isotópicamente no modificado análogo de tal forma que la posición(es), pero no necesariamente el número, de cada núclido etiquetado es definido. Un compuesto selectivamente etiquetado se puede considerar como una mezcla de compuestos específicamente etiquetados.

Un compuesto selectivamente etiquetado puede ser:

- (a) Múltiplemente etiquetado cuando la modificación isotópica ocurre en más de un átomo, sea en un conjunto de átomos equivalentes en un sitio, por ejemplo H en SiH₄, o en diferentes sitios de una molécula como en el B en [B₆H₆]²⁻;
- (b) Etiquetado mixto cuando hay más de un núclido etiquetado en el compuesto, por ejemplo, B y C en B₈C₂H₁₀ (Nota 2k).

II-2.4.3.2 Fórmulas de compuestos selectivamente etiquetados

Un compuesto selectivamente etiquetado no puede ser descrito por una única fórmula estructural. Entonces es representado por inserción del símbolo(s) del núclido precedido por el localizador(es) necesario (letras y/o numerales) pero sin subíndices multiplicadores, encerrados entre corchetes cuadrados directamente ante de la fórmula usual, o, si es necesario, antes de las partes de la fórmula que tengan una numeración independiente. Los localizantes idénticos no son repetidos.

Nota 2k : Cuando hay sólo un átomo de un elemento en un compuesto que puede ser modificado, sólo el etiquetado específico puede resultar (ver Sección H2.4.2).

Cuando están presentes diferentes núclidos en el mismo lugar en la fórmula, los símbolos de los núclidos se ordenan de acuerdo a la Sección II-2.2.5.

Ejemplos:

<i>Mezcla de compuestos isotópicamente sustituidos</i>	<i>cuando se agrega a</i>	<i>compuesto isotópicamente no modificado</i>	<i>resulta en</i>	<i>compuesto selectivamente etiquetado</i>
$\text{SOCl}^{36}\text{Cl}$ $\text{SO}^{36}\text{Cl}_2$ $\text{H}_3^{32}\text{PO}_3^{18\text{o}}$ $\text{H}_3^{32}\text{PO}_3^{18\text{o}}$ $\text{H}_3^{32}\text{PO}_4$ $\text{H}_3\text{PO}_3^{18\text{O}}$ $\text{H}_3\text{PO}_2^{18\text{O}_2}$ $\text{H}_3\text{PO}^{18\text{O}_2}$ etc., o cualquiera de dos de arriba		SOCl_2 H_3PO_4		$[\text{}^{36}\text{Cl}]\text{SOCl}_2$ $[\text{}^{18}\text{O}, \text{}^{32}\text{P}]\text{H}_3\text{PO}_4$
$\text{PH}_2^2\text{H}, \text{PH}^2\text{H}_2, \text{P}^2\text{H}_3$ o cualquiera de dos de arriba		PH_3		$[\text{}^2\text{H}]\text{PH}_3$
$\text{H}_2^2\text{HSi-SiH}_3$ $\text{H}^2\text{H}_2\text{Si-SiH}_3$ $^2\text{H}_3\text{Si-SiH}_3$ o cualquiera de dos de arriba		$\text{H}_3\text{Si-SiH}_3$		$[\text{}^1\text{-}^2\text{H}]\text{Si}_2\text{H}_6$

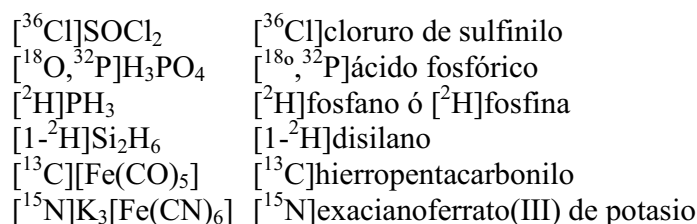
El método para escribir fórmulas tal como el dado en las recomendaciones previas también puede ser utilizado si un compuesto se representa por su fórmula molecular antes que por su fórmula estructural.

II-2.4.3.3 Nombres de compuesto selectivamente etiquetado

El nombre de un compuesto selectivamente etiquetado se forma de la misma manera que un compuesto selectivamente etiquetado (ver Sección II-2.4.2.3) excepto que los subíndices multiplicativos que siguen a los símbolos atómicos generalmente son omitidos, excepto según lo descrito en la Sección II-2.4.3.4. Los localizantes idénticos correspondientes al mismo elemento no son repetidos.

El nombre de un compuesto selectivamente etiquetado difiere del nombre del correspondiente al isotópicamente sustituido en el uso de los corchetes cuadrados rodeando al descriptor del núclido antes que los paréntesis y en la omisión de los localizantes idénticos repetidos y suscriptos multiplicativos

Ejemplos:



II-2.4.3.4 Indicación del número de núclidos etiquetados

En un compuesto selectivamente etiquetado formalmente generado de la mezcla de un compuesto isotópicamente no modificado con varios compuestos isotópicamente sustituidos conocidos, el número o el número posible del núclido(s) etiquetados para cada posición puede ser indicado por suscriptos al símbolo(s) atómico del descriptor isotópico tanto en la fórmula como en el nombre. Dos o más suscriptos que se refieran al mismo símbolo de un núclido se separan por una coma. Para un compuesto múltiplemente etiquetado o mixto (ver Sección II-2.4.3.1), los suscriptos se escriben en forma sucesiva en el mismo orden en que los diversos compuestos isotópicamente sustituidos son considerados. El subíndice cero se usa para indicar que uno de los compuestos isotópicamente sustituidos no está modificado en la posición indicada.

Ejemplos (para la numeración ver Sección II-2.5.3):

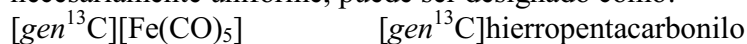
<i>Una mezcla conocida de compuestos isotópicamente sustituidos</i>	<i>cuando se agrega a compuesto isotópicamente no modificado</i>	<i>resulta un compuesto selectivamente etiquetado</i>
$\text{SiH}_2^2\text{HOSiH}_2\text{OSiH}_3$	$\text{H}_3\text{SiOSiH}_2\text{OSiH}_3$	$[1\text{-}^2\text{H}_{1,2}]\text{SiH}_3\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$
$\text{SiH}^2\text{H}_2\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$		$[1\text{-}^2\text{H}_{1,2}]\text{trisoloxano}$
$\text{SiH}^2\text{H}_2\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$		$[1,1\text{-}^2\text{H}_{2,2},2\text{-}^{18}\text{O}_{0,1}]\text{SiH}_3\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$
$\text{SiH}^2\text{H}_2^{18}\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$		$[1,1\text{-}^2\text{H}_{2,2},2\text{-}^{18}\text{O}_{0,1}]\text{trisoloxano}$
$\text{SiH}_3^{18}\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$		$[1\text{-}^2\text{H}_{0,2},2\text{-}^{18}\text{O}_{1,0}]\text{SiH}_3\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$
$\text{SiH}^2\text{H}_2\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$		$[1\text{-}^2\text{H}_{0,2},2\text{-}^{18}\text{O}_{1,0}]\text{trisoloxano}$

II-2.4.3.5 Etiquetado general

En un compuesto selectivamente etiquetado donde todos los átomos de un elemento particular están isotópicamente modificados, pero no necesariamente en forma uniforme, se puede agregar el descriptor italizado *gen* para indicar un etiquetado general, el cual precede en forma inmediata, sin un guión, al símbolo del núclido en el descriptor isotópico del nombre o fórmula (Nota 21).

Ejemplos:

1. $[^{13}\text{C}][\text{Fe}(\text{CO})_5]$ donde cada ligando carbonilo es etiquetado con ^{13}C , pero no necesariamente uniforme, puede ser designado como:



2. $[^{190}\text{Os}][\text{Os}_6(\text{CO})_{18}]$ $(\text{gen}^{190}\text{Os})$ exaosciooctadecacarbonilo

II-2.4.3.6 Etiquetado uniforme

En un compuesto selectivamente etiquetado donde todos los átomos de un elemento particular están etiquetados en la misma relación isotópica, el descriptor italizado *unf*, para indicar un etiquetado uniforme, se puede agregar inmediatamente antes sin el guión, al símbolo del núclido en el descriptor isotópico del nombre o la fórmula (ver Nota 2l).

Ejemplos:

1. [¹³C][Fe(CO)₅] donde el símbolo ¹³C está igualmente distribuido en cada carbonilo del ligando, se puede designar como
[*unf*¹³C][Fe(CO)₅] [*unf*¹³C]hierropentacarbonilo
2. [¹⁹⁰Os][Os₆(CO)₁₈] donde el símbolo ¹⁹⁰Os está igualmente distribuido entre los seis átomos de osmio puede ser designado como:
[*unf*¹⁹⁰Os][Os₆(CO)₁₈] [*unf*¹⁹⁰Os]exaosmiodoodecacarbonilo

El descriptor italizado *unf* puede ser seguido de los localizantes apropiados para indicar el etiquetado uniforme en posiciones especificadas.

Ejemplo:

3. [³²Si¹SiH₂ClOSiH₂OSiH₃^{2 3 4 5}] donde el ³²Si igualmente distribuido entre los únicos átomos de silicio terminales de silicio pueden ser designados como:
[*unf*-1,5-³²Si]SiH₂ClOSiH₂OSiH₃ 1-cloro[*unf*-1,5-³²Si]trisiloxano

II-2.4.4 Compuestos etiquetados no selectivamente

II-2.4.4.1 Definición de compuestos etiquetado no selectivamente

Un compuesto isotópicamente etiquetado se llama no selectivamente etiquetado cuando tanto la posición(es) y el número del núclido(s) etiquetado están indefinidos. El etiquetado no selectivo se indica en la fórmula y en el nombre insertando el símbolo del núclido, encerrado entre corchetes cuadrados, directamente antes de la fórmula o nombre usual. No se usan localizantes o subíndices precedentes (ver Nota 2m).

Ejemplos:

1. [¹⁰B]H₂BH₂BHCl 1-cloro[¹⁰B]diborano(6)
2. [³⁰Si]SiH₃SiH₂SiH₃ [³⁰Si]trisilano

II-2.4.4.2 Materiales no moleculares etiquetados isotópicamente

Los materiales no moleculares isotópicamente etiquetados, tales como los sólidos iónicos y las sustancias poliméricas, donde los núclidos etiquetantes pueden ser dispersados a través de un retículo cristalino o un entramado polimérico, son considerados etiquetados no selectivamente. Esto está designado en la fórmula y el nombre de acuerdo a lo visto en la Sección II-2.4.4.1, pero la fórmula y el nombre deberán estar encerrado entre paréntesis seguidos por el subíndice *x*.

Nota 2l : Las recomendaciones para la nomenclatura de los compuestos orgánicos isotópicamente modificados (ver Nota 2c) emplean el símbolo C y U para el etiquetado general y uniforme respectivamente, en vez de *gen* y *unf* recomendados aquí.

Nota 2m : Cuando los únicos átomos de un elemento que pueden ser modificados están en la misma posición en un compuesto, sólo puede tener lugar el etiquetado específico o selectivo.

Ejemplos:

- | | |
|--|---|
| 1. $[\text{}^{35}\text{Cl}](\text{NaCl})_x$ | $[\text{}^{35}\text{Cl}]$ (cloruro de sodio) _x |
| 2. $[\text{}^{235}\text{U}](\text{UO}_2)_x$ | $[\text{}^{235}\text{U}]$ (dióxido de uranio) _x |
| 3. $[\text{}^{29}\text{Si}](\text{SiO}_2)_x$ | $[\text{}^{29}\text{Si}]$ (dióxido de silicio) _x |

II-2.4.5 Compuestos isotópicamente deficientes

Un compuesto isotópicamente etiquetado es llamado isotópicamente deficiente cuando el contenido isotópico de uno o más elementos se ha quitado, es decir, un núclido está presente en algo menos que la relación natural. Un compuesto isotópicamente deficiente se designa en la fórmula y en el nombre por agregado del término *def* italizado precediendo inmediatamente, sin el guión, al símbolo del núclido apropiado (Nota 2n).

Ejemplos:

- | | |
|---|---|
| 1. $[\text{def}^{10}\text{B}]\text{H}_3\text{BO}_3$ | $[\text{def}^{10}\text{B}]$ ácido bórico |
| 2. $[\text{def}^{235}\text{U}]\text{UF}_6$ | $[\text{def}^{235}\text{U}]$ hexafluoruro de uranio |

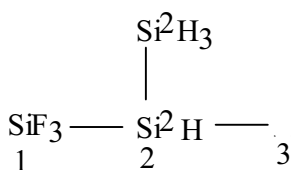
II-2.5 LOCALIZANTES Y NUMERACIÓN DE LOS COMPUESTOS ISOTÓPICAMENTE MODIFICADOS

II-2.5.1 Indicación de la posición de las modificaciones isotópicas

Las posiciones de las modificaciones isotópicas de un compuesto isotópicamente modificado se indican, tanto como sea posible, por los localizantes normalmente usados para la numeración de cadenas, anillos, o racimos de átomos en el correspondiente compuesto no modificado (Notas 2c, 2d). La asignación de localizantes en un compuesto isotópicamente modificado no debería ser cambiada respecto de aquella del correspondiente compuesto isotópicamente modificado.

Ejemplos:

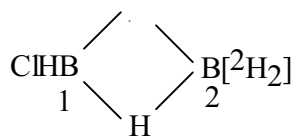
1.



1,1,1,3,3,3-exafluoro-2-[(²H₃)silil]-(2-²H₁)trisilano
 (Nombre no modificado: 1,1,1,3,3,3-exafluoro-2-sililtrisilano)

Nota 2n : Se encuentran disponibles productos comerciales en los cuáles uno o más isótopos de un elemento, particularmente los elementos litio, boro, carbono, nitrógeno, uranio y los gases nobles, han sido eliminados. Estos materiales no contienen la relación natural de composición isotópica y, entonces, si se usa para la investigación científica, debería ser así indicado. Además, ciertos materiales que existen naturalmente, contienen elementos deficientes en ciertos núclidos cuando se comparan a lo que usualmente se considera son las relaciones isotópicas naturales.

2.



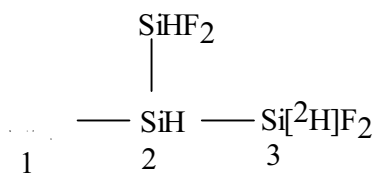
1-cloro[2,2- $^2\text{H}_2$]diborano(6)
 [Nombre no modificado: 1-clorodiborano(6)]

II-2.5.2 Prioridad

Cuando hay una elección entre las cadenas más largas o una elección entre anillos equivalentes, en un compuesto isotópicamente no modificado, la cadena o anillo preferido del compuesto isotópicamente modificado se elige de manera tal que se incluye el número máximo de átomos o grupos modificados. Si todavía queda una opción, la preferencia se da a la cadena o anillo que contiene primero un núclido de mayor número atómico, y luego un núclido de mayor número másico.

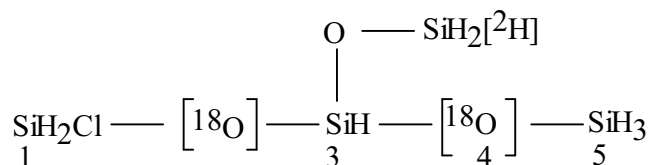
Ejemplos (ver también Nota 2c, recomendación H-3.21):

1.



2-(difluorosilil)-1,1,1,3,3,3-pentafluoro[3- $^2\text{H}_1$]trisilano
 [nombre no modificado: 2-(difluorosilil)-1,1,1,3,3-pentafluoro-trisilano]
 (Ver Nota 1b, p.10)

2.



1-cloro-3-([$^2\text{H}_1$]siloxi)[2,4- $^{18}\text{O}_2$]trisiloxano
 [nombre no modificado: 1-cloro-3-siloxitrisiloxano]

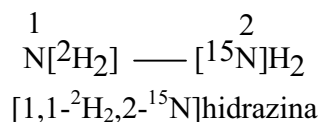
II-2.5.3 Numeración

Cuando hay elección entre numeraciones equivalentes en un compuesto isotópicamente no modificado, el punto inicial y la dirección de la numeración se escogen para el compuesto isotópicamente modificado análogo, de modo tal de generar los localizantes más bajos de los átomos o grupos considerados juntos como una serie en orden numérico ascendente (ver Nota 2c, Sección C-15.11) sin tomar en cuenta el tipo de núclido o número másico. Si aún hay una opción, la preferencia para los localizantes más bajos se

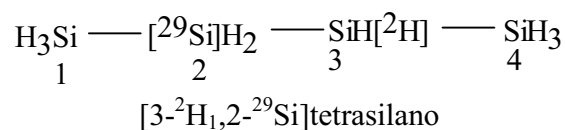
otorga primero al número atómico más alto y luego al núclido con el número másico mayor.

Ejemplos:

1.



2.

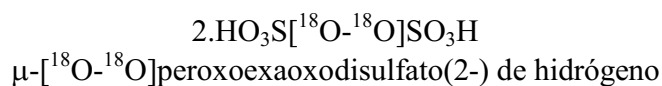
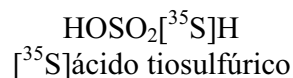


II-2.5.4 Símbolos y prefijos de los grupos

Cuando ocurre una modificación isotópica en una posición que normalmente no está asignada a un localizante, los símbolos o prefijos italizados de los grupos se pueden usar para denotar su posición.

Ejemplos:

1.

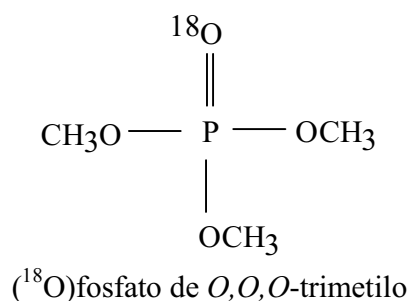


II-2.5.5 Símbolos de núclidos en bastardillas

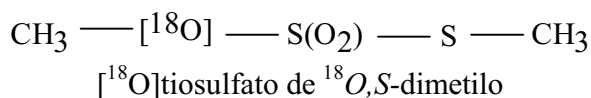
Los símbolos de núclidos y/o los símbolos atómicos italizados se pueden usar como localizantes para distinguir núclidos diferentes del mismo elemento.

Ejemplos:

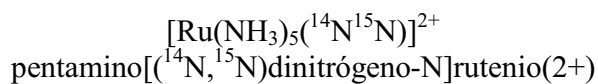
1.



2.



3.



II-2.6 RESUMEN DE LOS TIPOS DE COMPUESTOS ISOTÓPICAMENTE MODIFICADOS

<i>Tipo de modificación isotópica</i>	<i>Ejemplos fórmula y nombre</i>	<i>Aclaraciones explicativas</i>
Sustituido	SiH ₃ ² H (² H ₁)silano	Todas las moléculas contienen uno y sólo un átomo de ² H
Específicamente etiquetado	SiH ₃ [² H] [² H ₁]silano	Contenido total de ² H mayor que la cantidad natural; el exceso de ² H está en las moléculas simplemente sustituidas.
Selectivamente Etiquetado	[1- ² H]Si ₂ H ₆ [1- ² H]disilano	Contenido total de ² H mayor que la cantidad natural; el exceso de ² H está en dos o más moléculas sustituidas y puede ocurrir en cualquier número en la posición especificada de una dada molécula.
	[² H _{1;3}]SiH ₄ [² H _{1;3}]silano	Contenido total de ² H mayor que la cantidad natural; el exceso de ² H tiene lugar en dos moléculas sustituidas una con el átomo ² H y la otra con tres átomos ² H.
No selectivamente etiquetado	[² H]Si ₃ H ₈ [² H]trisilano	Contenido total de ² H mayor que la cantidad natural; el exceso de ² H puede estar en cualquier número y en cualquier posición en una o más moléculas sustituidas.
Isotópicamente deficiente	[<i>def</i> ²⁹ Si]SiHF ₃ [<i>def</i> ²⁹ Si]trifluorosilano	El contenido total de ²⁹ Si es menor que la cantidad natural.

II-3 Complejos Metálicos de Tetrapirroles

CONTENIDOS

- II-3.1 Introducción
- II-3.2 La construcción de nombres sistemáticos
 - II-3.2.1 Descripción general de los compuestos metálicos comunes de tetrapirroles
 - II-3.2.2 La numeración de los átomos en los ligandos tetradentados del tetrapirrol
 - II-3.2.3 Nomenclatura de coordinación
 - II-3.2.4 Descriptores estereoquímicos
- II-3.3 Nombres triviales
- II-3.4 Tipos estructurales menos comunes
 - II-3.4.1 Nombre de complejos con estructuras desconocidas
 - II-3.4.2 Modos de coordinación menos comunes
- II-3.5 Nombres triviales de porfirinas, clorinas, clorofilas, bilanos, anillos fundamentales y especies relacionadas
 - II-3.5.1 Porphirinas nombradas trivialmente
 - II-3.5.2 Clorinas nombradas trivialmente
 - II-3.5.3 Isobacterioclorinas trivialmente nombradas
 - II-3.5.4 Clorofilas nombradas trivialmente
 - II-3.5.5 Bilanos trivialmente nombrados
 - II-3.5.6 Anillos fundamentales y estructuras relacionadas trivialmente nombradas

II-3.1 INTRODUCCIÓN

Las recomendaciones provisionales acerca de la nomenclatura de tetrapirroles se publicaron originalmente por la IUPAC-IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature (JCBN) en 1979 Nota 3a), y luego fueron modificadas y extendidas en una publicación conjunta IUPAC-IUB en 1986 (Nota 3b). En tanto que se ha desarrollado una aproximación sistemática para nombrar a las porfirinas y sus derivados a los fines de reducir el número de nombres triviales aún existentes en la literatura corriente, aquellos basados en el sistema de Fischer (Nota 3c) están tan bien establecidas que es probable que su uso continúe por algún tiempo. Tales nombres son mantenidos al presente y algunos de los más importantes se dan en la Sección II-3.5.

II-3.2 LA CONSTRUCCIÓN DE NOMBRES SISTEMÁTICOS

II-3.2.1 Descripción general de complejos de coordinación metálicos de tetrapirroles comunes

Un tetrapirrol casi planar actúa comúnmente como un ligando dianiónico tetradentado y se coordina con un ión metálico para formar un complejo aproximadamente

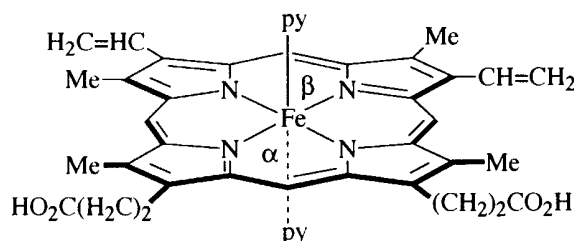
Nota 3a : Nomenclature of Tetrapyrroles, Recommendation 1978 *Pure Appl. Chem.*, **51**, 2251 (1979); *Eur. J. Biochem.* **180**, 1 (1980).

Nota 3b : Nomenclature of Tetrapyrroles, Recommendations 1986, *Pure Appl. Chem.*, **59**, 779 (1987); *Eur. J. Biochem.* **178**, 277 (1988).

Nota 3c : H. Fischer and H. Orth, *Die Chemie des Pyrrols*, Volume II.1, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1937; H. Fischer and A. Stern, *Die Chemie des Pyrrols*, Volume II.2, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1940.

cuadrado plano. En varios complejos adicionalmente hay dos ligandos monodentados axiales, a cada lado del plano ecuatorial, formados por el ión metálico y el ligando tetrapirrol.

1.



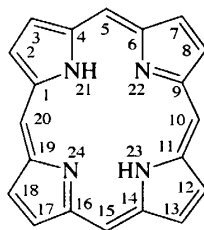
Un complejo de coordinación tetrapirrólico conteniendo un ligando dianiónico tetradentado del tetrapirrol y dos ligandos axiales de piridina (Me = metilo, py = piridina).

II-3.2.2 La numeración de los átomos en el ligando tetradentado del tetrapirrol

El sistema anular tetrapirrólico macrocíclico fundamental tiene el nombre trivial porfirina. Esta unidad estructural, junto con el esquema de numeración 1 – 24 de los átomos se muestra más abajo. Para una discusión detallada de la numeración de los tetrapirroles ver Nota 3b y Nota 3d. La porfirina básica exhibe tautomería con respecto a las localizaciones de átomos de hidrógeno unidos a los átomos de nitrógeno y necesitan hacerse algunas suposiciones específicas acerca de sus localizaciones a los fines de la nomenclatura (Nota 3b). En el caso del porfirinato dianiónico, los hidronios se han eliminado y este problema no existe.

Ejemplo:

1.



El esquema de numeración 1-24 en las porfirinas.

II-3.2.3 Nomenclatura de coordinación

Los principios básicos en la construcción del nombre de coordinación para los complejos siguen las mismas reglas dadas en el Capítulo I-10 de la Nota 3e. El nombre del ligando macrocíclico dianiónico tiene la terminación –ato. Así, clorin queda como clorinato, porfirin pasa a porfirinato, etc. (ver Sección II-3.5).

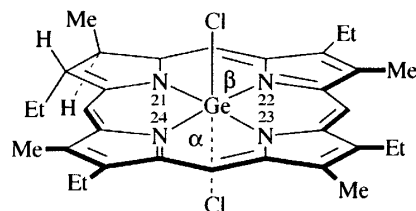
Los nombres de los ligandos se colocan en orden alfabético y preceden al nombre del átomo central. El estado de oxidación del ión metálico se puede indicar por el número

Nota 3d : R. S. Cahn, C. Ingold and V. Prelog, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **5**, 385 (1966); V. Prelog and G. Helmchen, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **21**, 567 (1983).

Nota 3e : *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publication, Oxford, 1990.

de oxidación (número de Stock), o la carga de la entidad de coordinación completa por el número de carga colocado entre paréntesis luego del nombre del metal.

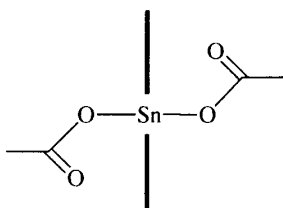
Ejemplos:



dicloro[2,7,12,17-tetraetil-3,8,13,18-tetrametilporfirinato]germanio(IV)

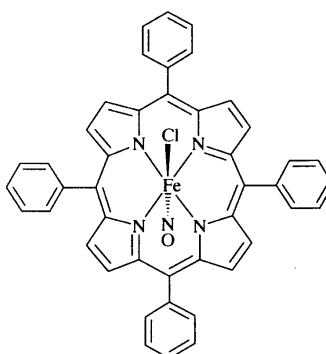
A veces es deseable designar los átomos coordinados al átomo metálico. Esto se puede lograr usando la convención kappa (κ) (ver Sección I-10.6.2.2 de la Nota 3e). En el caso de los complejos metálicos del tetrapirrol está claramente demostrada la superioridad de la convención kappa sobre la práctica anterior de poner como sufijos los símbolos en bastardillas de los átomos ligantes al nombre del ligando. Entonces el nombre del complejo es dicloro(2,7,12,17-tetraetil-3,8,13,18-tetrametilporfirinato- $\kappa^4\text{N}^{21,22,23,24}$)germanio(IV) (ver Nota 1b, p.10). El nombre indica que el ligando porfirinato es tetradentado y se coordina a través de los átomos de nitrógeno, los cuáles poseen los localizantes 21-24. Cuando la coordinación se concreta a través de los nitrógenos, sus localizantes pueden ser omitidos.

2. En la figura, la línea oscura gruesa denota la estructura planar porfirínica



bis(acetato- κO)(2,3,7,8,12,13,17,18-octaetilporfirinato- $\kappa^4\text{N}^{21,22,23,24}$)estaño(IV)

3.



cloro(nitrosil- κN)(5,10,15,20-tetrafenilporfirinato- $\kappa^4\text{N}^{21,22,23,24}$)hierro

II-3.2.4 Descriptores estereoquímicos

Hay dos maneras de dar información estereoquímica acerca de un complejo metálico tetrapirrólico. El método descrito en la Nota 3b se basa en considerar al ligando

tetrapirrol en aquella orientación que permita la numeración en sentido horario cuando se mira desde arriba. El ligando axial debajo del plano del tetrapirrol se designa con α y aquel sobre el plano con β . Las posiciones relativas de los dos ligandos piridina se indican en el Ejemplo 1 de la Sección II-3.2.1.

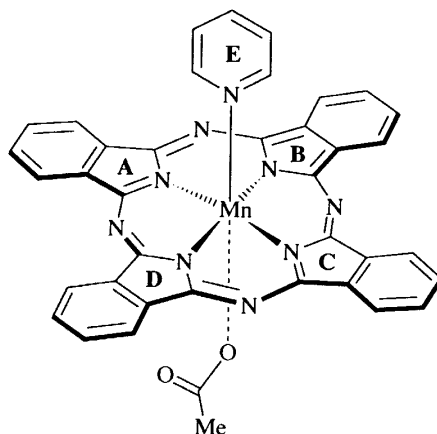
La Sección I-10.5 de la Nota 3e presenta una aproximación sistemática general para designar información estereoquímica en entidades de coordinación mononuclear. Ello involucra el uso del símbolo poliédrico (I-10.5.1) junto con el índice configuracional. En la derivación del índice de configuración, a los átomos ligandos se les asignan números de prioridad aplicando el método de Cahn, Ingold y Prelog (Las denominadas reglas CIP; ver Nota 3d y Sección I-1.5.3 de la Nota 3e). La aplicación de la diferencia máxima *trans* de los números de prioridad resulta en el índice de configuración final usado como prefijo en el nombre.

En el caso de los complejos metálicos del tetrapirrol la asignación de números prioritarios por las reglas CIP involucra varios pasos y es más conveniente usar los descriptores α , β para suministrar información estereoquímica. Sin embargo, el procedimiento presentado en la Sección I-10.5 de la Nota 3e es generalmente apropiado para todos los tipos de entidades de coordinación monocluereas y también da información acerca del poliedro de coordinación ideal.

La asignación de los números de prioridad por las reglas CIP requiere que los números atómicos mayores precedan a los menores. Así, al oxígeno se le asigna el número de prioridad 1.

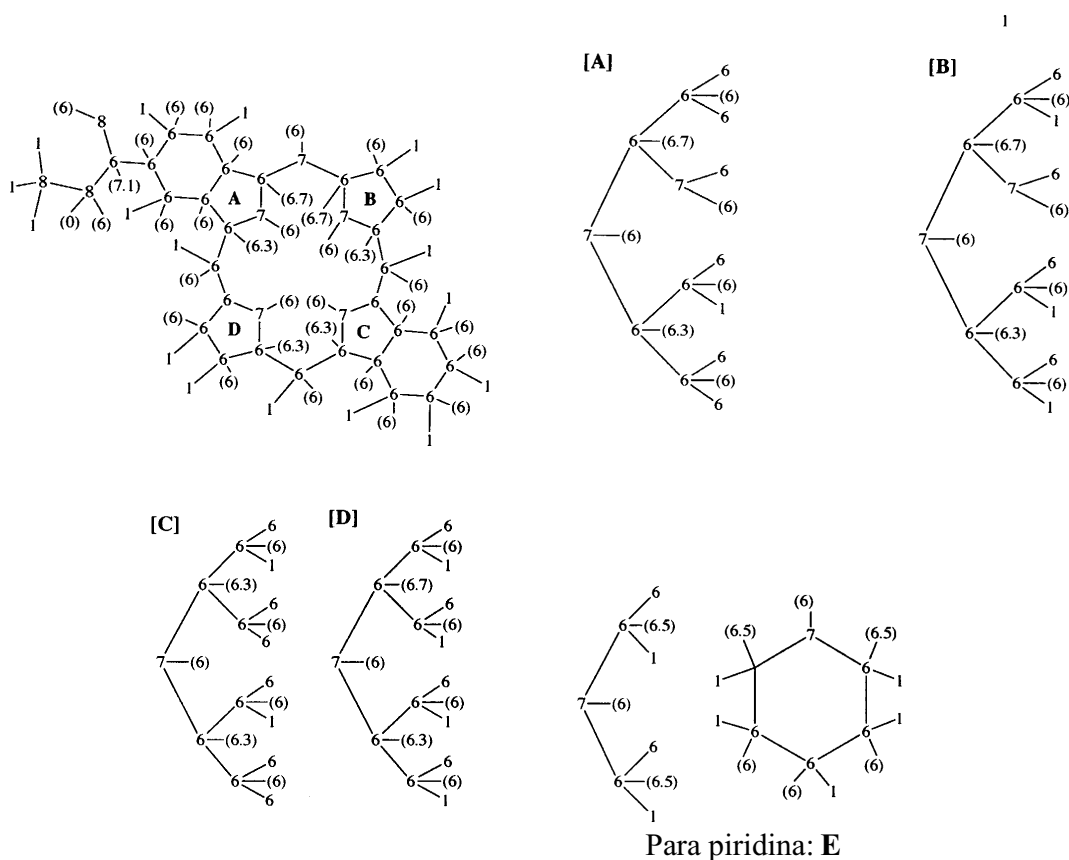
Los cinco átomos de nitrógeno en los anillos denotados **A-E** más arriba unidos al manganeso son distinguidos por la aplicación sucesiva de las sub-reglas de la Sección I-10.5 de la Nota 3e. En los siguientes diagramas, las conectividades de cada átomo de nitrógeno son discutidas en términos de los números atómicos de los átomos. Los números de prioridad se asignan como se indica en la Nota 3d.

Ejemplos:



α -(acetato)(ftalocianinato)- β -(piridin)manganeso(III)

Para el anillo tetrapirrónico:



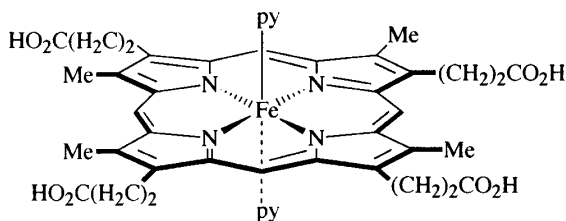
El conjunto completo de números prioritarios es así: O (1); A (2); B (3); E (4); C (5); D (6).

El índice configuracional en el complejo octaédrico (*OC-6*) está determinado por dos dígitos. El primero indica el número de prioridad de un ligando *trans* con respecto al ligando que tiene el número de prioridad 1. El segundo dígito es el número de prioridad de un ligando *trans* con respecto al ligando con el mayor número de prioridad en el plano de los cuatro átomos perpendicular al eje de referencia definido por el ligando de mayor prioridad (Sección I-10.5.4.2 de la Nota 3e).

Entonces el nombre del complejo es (*OC-6-45*)-(acetato)(ftalocianinato)(piridin)-manganeso(III).

Ejemplo:

2.



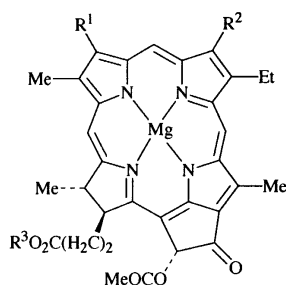
α,β -bis(piridina) {2,7,12,18-tetrametilporfirin-3,8,13,17-tetrakis(2-carboxietil)} hierro (II)
 6
 (*OC-6-12*)bis(piridina) {2,7,12,18-tetrametilporfirin-3,8,13,17-tetrakis(2-carboxietil)}
 hierro (II).

II-3.3 NOMBRES TRIVIALES

Debido a sus ocurrencias naturales, los complejos de magnesio y hierro de tetrapirroles se asocian con una extensa nomenclatura trivial. Por ejemplo, hay nueve nombres triviales que pueden ser usados para nombrar a las estructuras clorofilicas. Una lista completa (porfirinas, clorinas, etc.) se ofrece en la Sección II-3.5.

Ejemplos:

1.

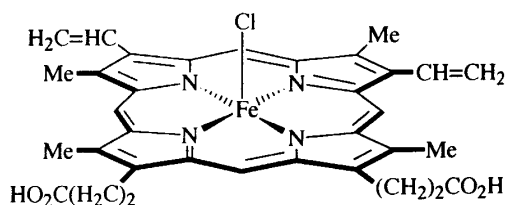


clorofila <i>a</i>	$R^1 = \text{CH}=\text{CH}_2$	$R^2 = \text{Me}$	$R^3 = \text{fitil}$
clorofila <i>b</i>	$R^1 = \text{CH}=\text{CH}_2$	$R^2 = \text{CHO}$	$R^3 = \text{fitil}$
clorofila <i>d</i>	$R^1 = \text{CHO}$	$R^2 = \text{Me}$	$R^3 = \text{fitil}$
mesoclorofila α	$R^1 = \text{Et}$	$R^2 = \text{Me}$	$R^3 = \text{fitil}$
clorofilida α	$R^1 = \text{CH}=\text{CH}_2$	$R^2 = \text{Me}$	$R^3 = \text{H}$

Igualmente, los nombres triviales para los complejos de hierro se pueden definir e interrelacionar como sigue:

Heme (haem)	complejo de hierro porfirina
ferroheme	complejo de porfirina hierro(II)
ferriheme	complejo de porfirina hierro(III)
hemocromo	complejo de hierro de bajo espín con uno o más ligandos axiales de campo intenso
ferrocromo	hemocrome hierro(II)
ferrihemocromo	hemocromo hierro(III)
hemin	complejo cloro(porfirinato)hierro(III)
hematin	complejo hidroxio(porfirinato)hierro(III)

2.



II-3.4 TIPOS ESTRUCTURALES MENOS COMUNES

La mayoría de los compuestos metálicos del tetrapirrol involucran una coordinación cuadrada plana del ión metálico a los cuatro átomos de nitrógeno con uno o más ligandos axiales formando un poliedro de coordinación piramidal cuadrado u octaédrico. Sin

embargo, hay un creciente número de complejos con características estructural diferenciales. Ellos se pueden nombrar de acuerdo a los principios descritos en el Capítulo I-10 de la Nota 3e.

II-3.4.1 Denominación de complejos con estructuras desconocidas

Los nombres estequiométricos se usan cuando se desconoce la estructura. La forma "complejo metálico de base libre" se recomienda en la Nomenclatura de Tetrapirroles (Nota 3b)

Ejemplo:

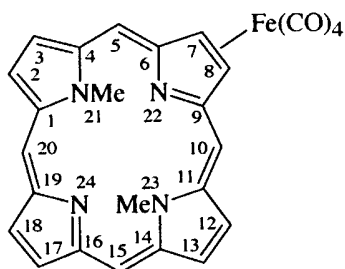
1. complejo de bilirrubina de zinc bilirrubinato de zinc

II-3.4.2 Modos de coordinación no comunes

Si el ión metálico está coordinado a un átomo distinto a los cuatro átomos de nitrógeno centrales, el mismo debe ser designado. En ausencia de designadores la coordinación se supone que es en los cuatro átomos de nitrógeno.

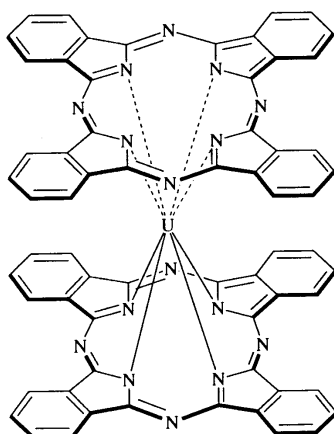
Ejemplos:

1.



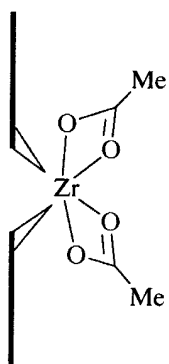
tetracarbonil[(7,8-η)-(21,23-dimetilporfirin)]hierro

2.



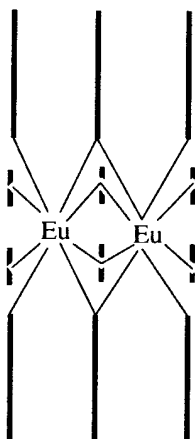
bis(ftalocianinato)uranio(IV)

3.



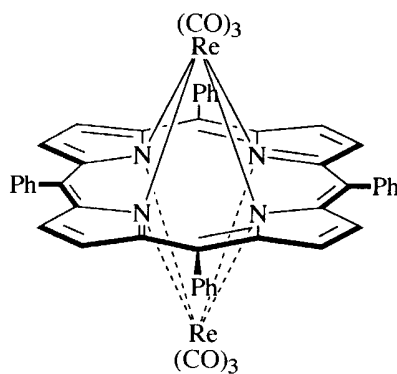
Bis(acetato- $\kappa^2 O, O$ ')(2,3,7,8,12,13,17,18-octaetilporfirinato- $\kappa^4 N^{21,22,23,24}$)circonio(IV)
La línea negra gruesa denota al anillo del octaetilporfirinato.

4.



μ -(2,3,7,8,12,13,17,18-octaetilporfirinato-1 $\kappa^4 N^{21,22,23,24}$,2 $\kappa^4 N^{21,22,23,24}$)-bis[(2,3,7,8,12,13,17,18-octaetilporfirinato- $\kappa^4 N^{21,22,23,24}$)europio(III)]

5.

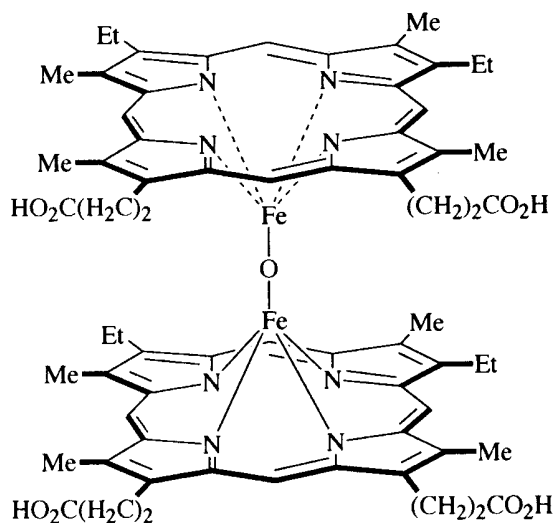


μ -(5,10,15,20-tetraporfirinato-1 $\kappa^4 N^{21,22,23}$:2 $\kappa^4 N^{22,23,24}$)bis(tricarbonilrenio)

Los designadores α y β se pueden usar para indicar la estereoquímica en los complejos polinucleares. El método sistemático dado en la Sección I-10.5 de la Nota 3e se emplea sólo para entidades de coordinación mononucleares y su elaboración para estructuras más extensas todavía debe establecerse.

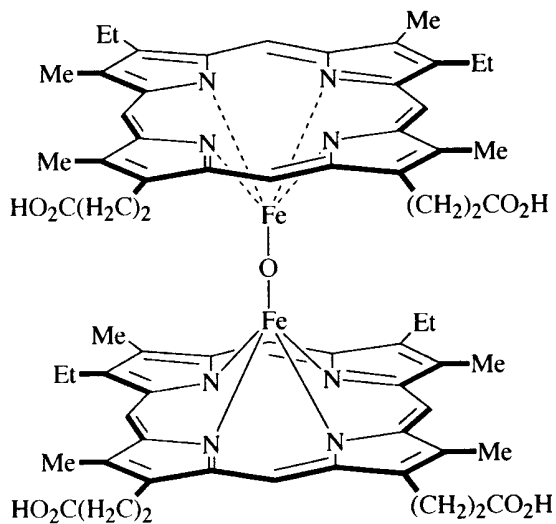
Ejemplos:

1.



μ -oxo-(α,β)-bis[mesoporphirinatohierro(III)]

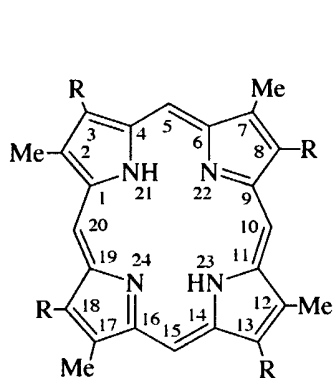
2.



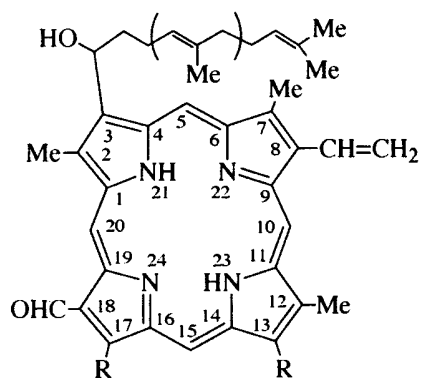
μ -oxo-(α,α)-bis[mesoporphirinatohierro(III)]

II-3.5 NOMBRES TRIVIALES DE PORFIRINAS, CLORINAS, CLOROFILAS, BILANOS, ANILLOS FUNDAMENTALES Y ESPECIES RELACIONADAS (Nota 3f)

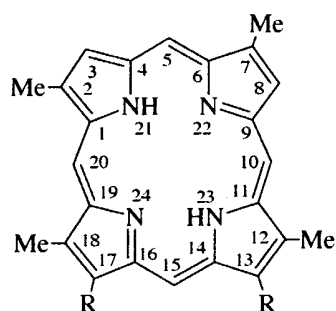
II-3.5.1 Porfirinas denominadas trivialmente



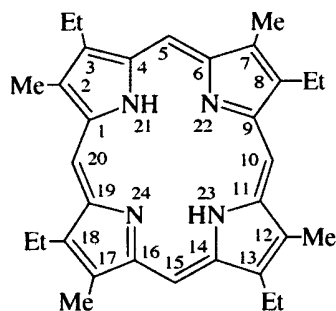
coproporfirina I (Nota 3g)



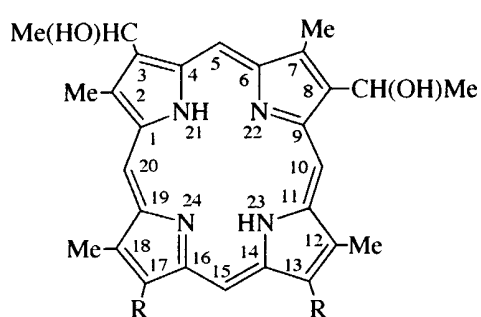
citoporfirina



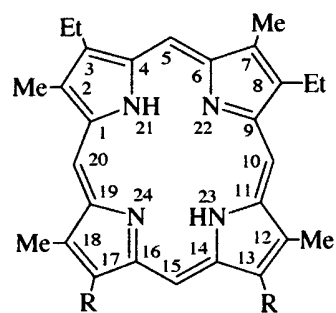
deuterioporfirina (Nota 3h)



etioporfirina I (Nota 3g)



hematoporfirina

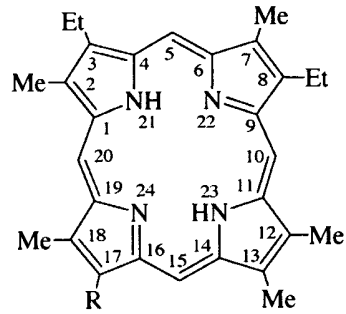


mesoporfirina

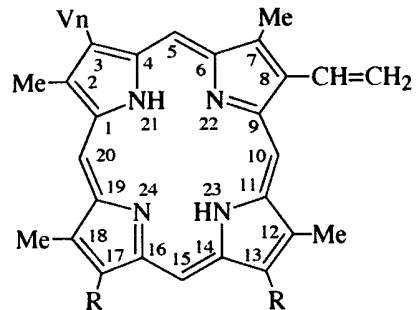
Nota 3f : Los nombres triviales también se aplican también a estructuras tautoméricas (ver Nota 3a) $R = CH_2CH_2CO_2H$.

Nota 3g : Se muestra sólo el Tipo I

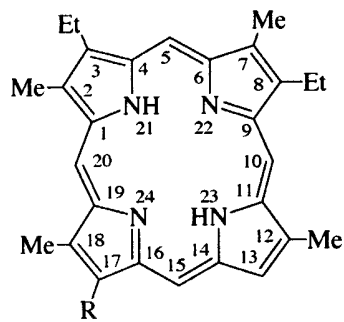
Nota 3h : No confundir con el compuesto deuterioporfirina isotópicamente etiquetado.



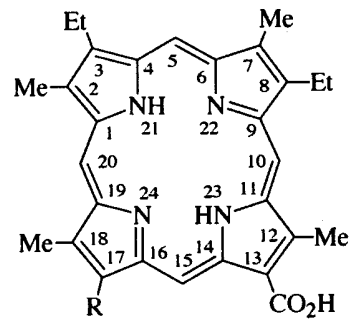
piloporfirina



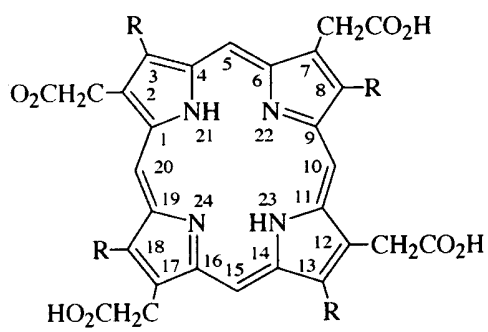
protoporfirina



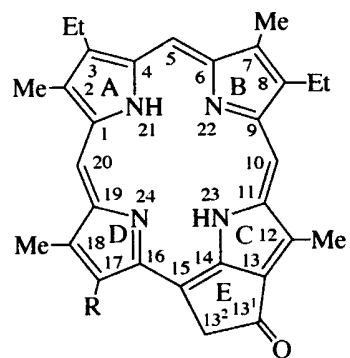
pirroporfirina



rodoporfirina

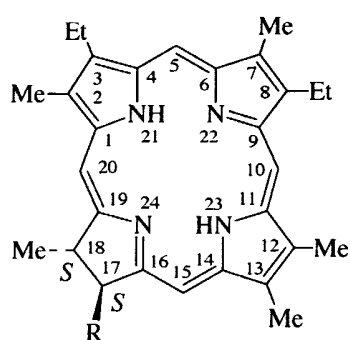


uroporfirina I (Nota 3g)

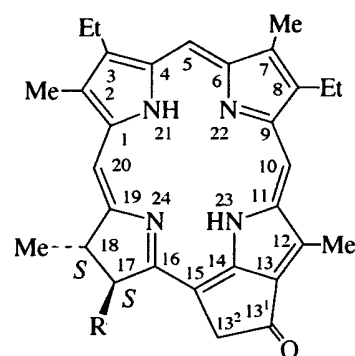


fitoporfirina

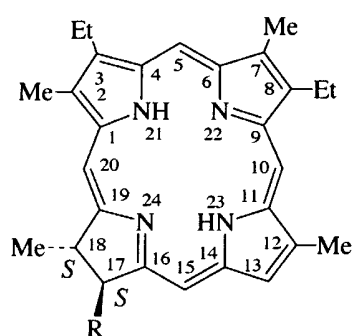
II-3.5.2 Clorinas nombradas trivialmente



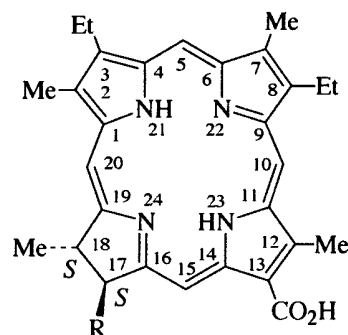
filoclorina (Nota 3i)



fitoclorina

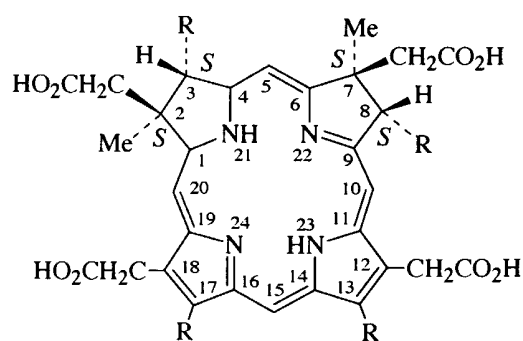


pirroclorina



rodoclorina (Nota 3i)

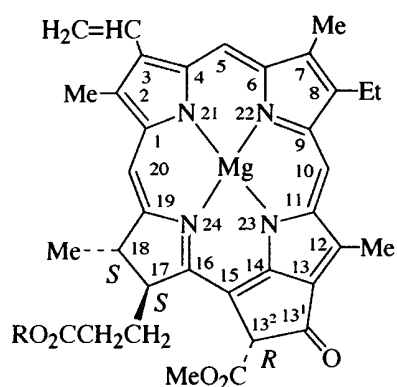
II-3.5.3 Isobacterioclorinas nombradas trivialmente



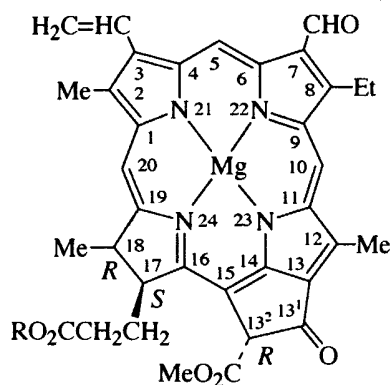
sirohidroclorina

Nota 3i : La filoclorina y la rodoclorina se han redefinido de modo que ellas ahora son 17,18-dihidroderivados de las correspondientes filoporfirina y rodoporfirina. Estos nombres de las clorinas han sido anteriormente usados en la literatura para referirse a la estructura mostrada, pero con los grupos vinílicos en lugar de los grupos etilo en la posición 3.

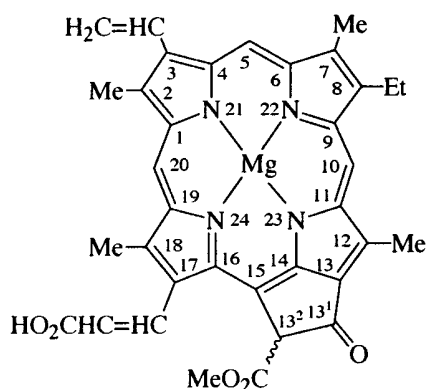
II-3.5.4 Clorofilas nombradas trivialmente



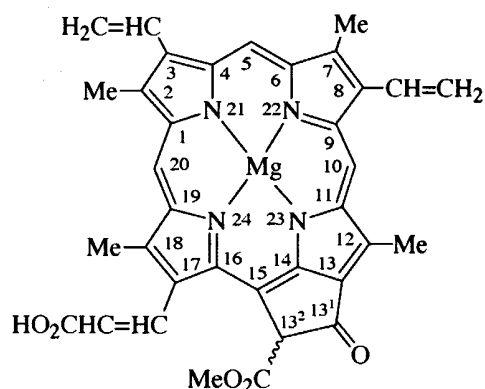
clorofila *a* (R = fitilo)



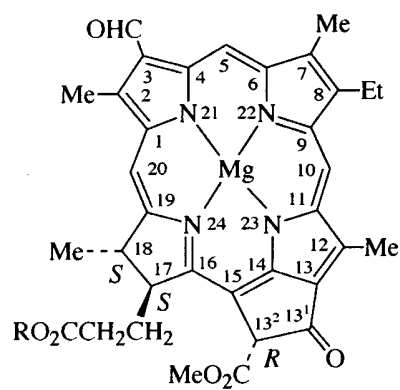
clorofila *b* (R = fitilo)



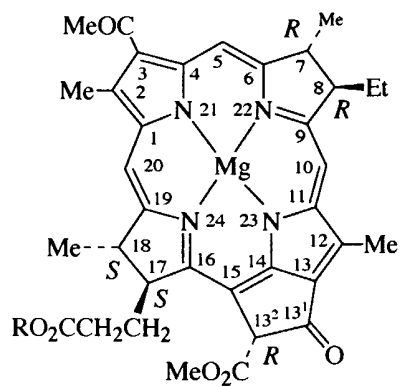
clorofila *c*₁ (Nota 3j)



clorofila *c*₂ (Nota 3j)

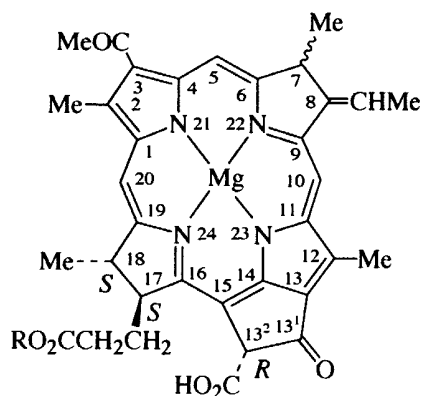
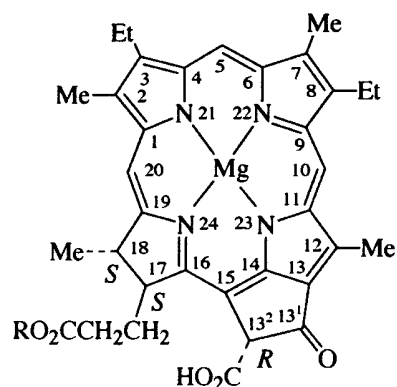


clorofila *d* (R = fitilo)

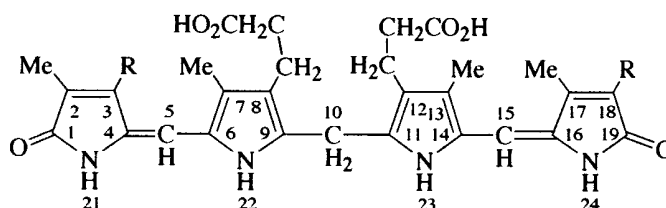


bacterioclorofila *a* (R = fitilo)

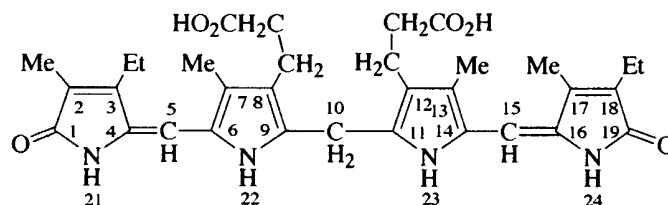
Nota 3j : En contraposición a las otras estructuras clorofílicas, las clorofilas *c*₁ y *c*₂ están no saturadas en las posiciones 17 y 18. Además, ellos son ácidos libres en la posición 17.

bacteriochlorofila *b* (R = fitilo)mesoclorofila *a* (R = fitilo)

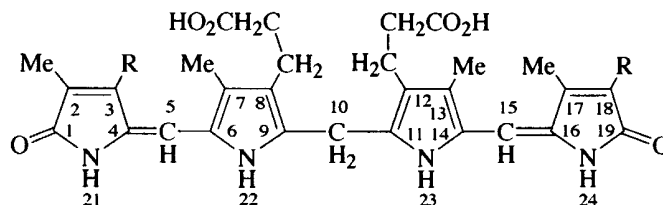
II-3.5.5 Bilanos trivialmente nombrados



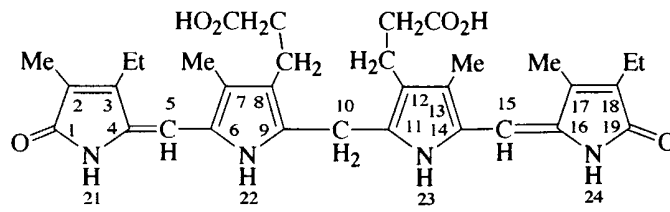
biliverdina (R = vinilo)



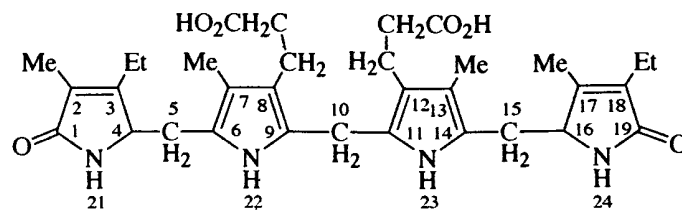
mesobiliverdina



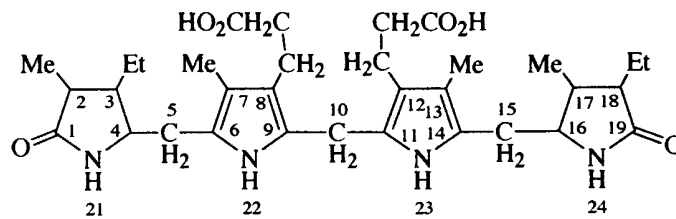
bilirubina (R = vinilo)



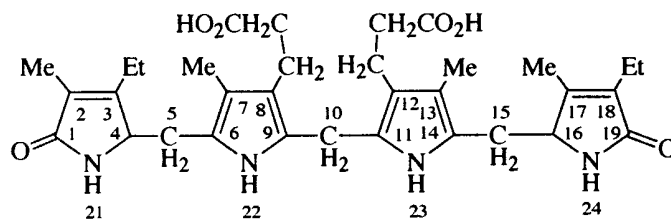
mesobilirubina



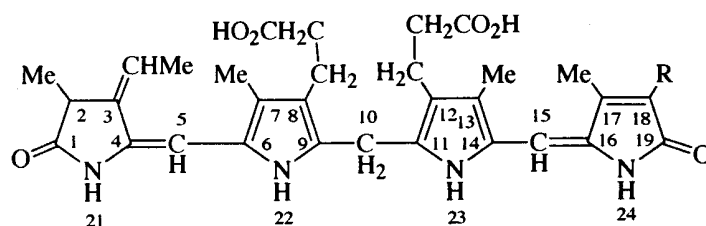
Urobilina



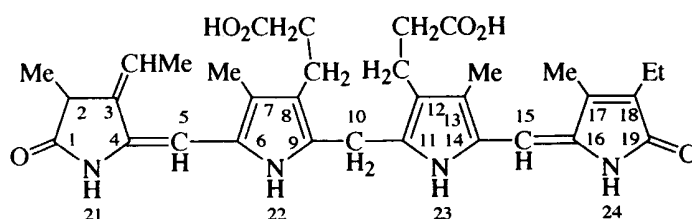
estercobilina



urobilinógeno

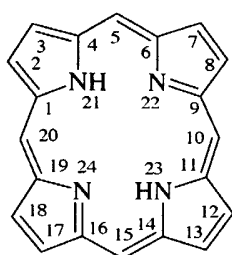


ficoeritrobilina (R = vinilo)

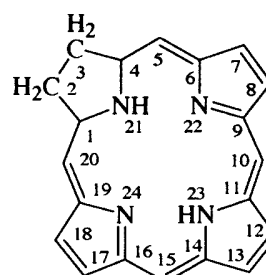


ficocianobilina

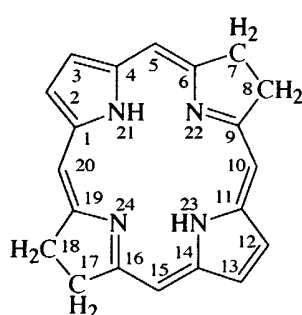
II-3.5.6 Anillos fundamentales y estructuras relacionadas nombradas trivialmente



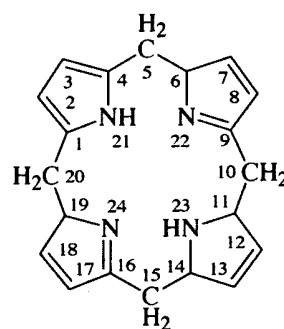
porfirina



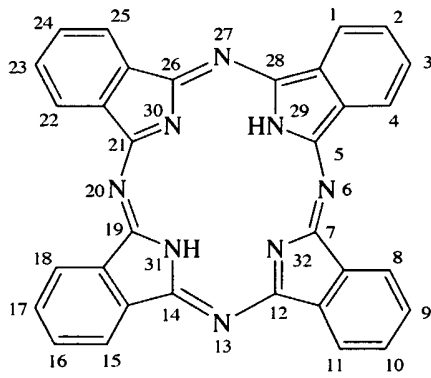
clorina



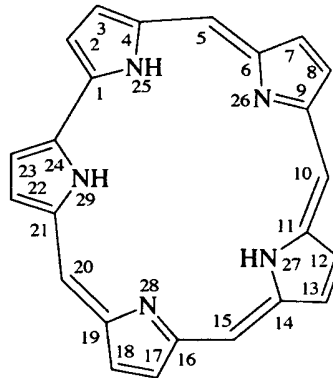
bacterioclorigina



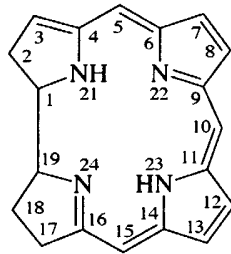
porfirinógeno



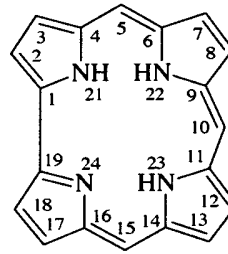
ftalocianina



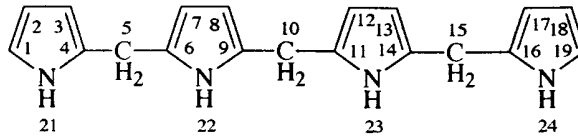
safirina



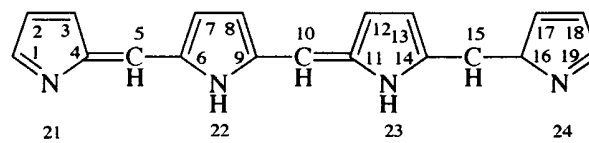
corrina



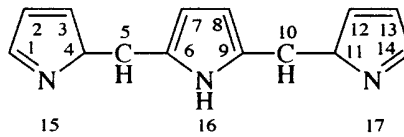
corrole



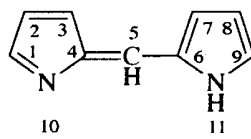
bilano



bilina



tripirrina



dipirrina

II-4 Hidruros de Nitrógeno y Cationes, Aniones y Ligandos Derivados

CONTENIDOS

- II-4.1 Introducción
- II-4.2 Hidruros principales
- II-4.3 Cationes
- II-4.4 Aniones
- II-4.5 Ligandos
 - II-4.5.1 General
 - II-4.5.2 Hidruros de nitrógeno y sus cationes como ligandos
 - II-4.5.3 Ligandos derivados formalmente de los hidruros de nitrógeno por pérdida de uno o más hidronios
 - II-4.5.4 Ligandos derivados de los monocationes de hidruros de nitrógeno por pérdida de uno o más hidronios del centro del nitrógeno no cargado

II-4.1 INTRODUCCIÓN

La nomenclatura de los hidruros de nitrógeno y sus derivados catiónicos, aniónicos y ligandos presenta problemas particularmente difíciles. Los hidruros simples y muchos de sus derivados son productos químicos comerciales con nombres no sistemáticos y abreviados bien establecidos. Los hidruros son inorgánicos pero numerosos derivados son orgánicos y su nomenclatura debe ser compatible con la nomenclatura aditiva (inorgánica) y sustitutiva (orgánica). También debe estar de acuerdo con las tendencias actuales hacia una nomenclatura más sistemática (ver Nota 4a).

Los nombres sistemáticos están basados en principios orgánicos y en el nombre "azano" donde hay un hidrógeno a ser sustituido y en el nombre "nitrógeno" donde no hay hidrógeno o sólo hidrógeno ácido.

Como la tendencia hacia una nomenclatura sistemática crece, estos nombres eventualmente deberían preferirse a los ya bien establecidos de los hidruros comunes y sus derivados. Por esta razón, los nombres triviales y los no sistemáticos pero bien establecidos nombres derivados se dan como alternativas a los nombres sistemáticos.

II-4.2 HIDRUROS PRINCIPALES

Tanto los nombres sistemáticos como los triviales para los hidruros de nitrógeno se indican en la Tabla II-4.1. Los nombres triviales amoníaco, hidrazina y azida de hidrógeno todavía son reconocidos y son excepciones a la nomenclatura sistemática de los hidruros. (Capítulo I-7 de la Nota 4a).

Nota 4a : *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.

<i>Compuesto</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
NH ₃	Azano	Amoníaco
N ₂ H ₄	Diazano	Hidracina
N ₂ H ₂	Diazeno	diimida
HN ₃	Trinitruro de hidrógeno	azida de hidrógeno

Tabla II-4.1 Nombres de los principales hidruros de nitrógeno

II-4.3 CATIONES

Los cationes derivados por adición de uno o más hidronios al hidruro de nitrógeno o de dinitrógeno pueden ser nombrados agregando *-ium* al nombre principal (ver Nota 4b) con la omisión de la *e* final del nombre del hidruro antes de la *i* (Sección I-8.2.3.3 de la Nota 4a; Sección C-816.2 de la Nota 4c) excepto que el NH₄⁺ se llama amonio. Los nombres sistemáticos y triviales para los cationes más comunes de los hidruros principales se dan en la Tabla II-4.2.

Si se prefiere, una unidad de carga se puede indicar por el uso del número de carga (Sección I-5.5.2 de la Nota 4a). Dos unidades de carga **deben** ser indicadas, sea por el número de carga o por la inserción de *di-* entre el nombre del hidruro y *-ium*.

<i>Catión</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
NH ₄ ⁺	Azanio	amonio
N ₂ H ₅ ⁺	Diazanio	hidrazinio
N ₂ H ₆ ⁺	diazanodio diazanio(2+)	hidrazinodio hidrazinio(2+)
N ₂ H ₃ ⁺	Diazenio	
N ₂ H ₄ ²⁺	diazenedio diazenio(2+)	
N ₂ H ⁺	Diazinio	
N ₂ H ₂ ²⁺	diazinidio diazinio(2+)	

Tabla II-4.2 Nombres de los cationes derivados de los hidruros principales por adición de uno o más hidronios.

Ejemplos:

1. NH₄Cl : cloruro de azanio o cloruro de amonio
2. (N₂H₅)₂SO₄ : sulfato de bis(diazanio) o sulfato de hidrazinio
3. (N₂H₆)Cl₂ : dicloruro de diazanedio o cloruro de hidrazinio(2+)

II-4.4 ANIONES

Los aniones derivados de los hidruros de nitrógeno por pérdida de uno o más hidronios se nombran tal como se indica en la Tabla II-4.3. La carga no necesita ser mostrada cuando el anión contiene solamente un átomo de nitrógeno y obedece la ley del

Nota 4b : El nombre diazina se usa como nombre principal para el dinitrógeno en la nomenclatura orgánica sustitutiva.

Nota 4c : *Nomenclature of Organic Chemistry*, Pergamon Press, Oxford, 1979.

octeto o cuando lleva una sola carga. En todo otro caso la carga se indica por el número de carga. Alternativamente, cuando el anión contiene hidrógenos reemplazables, la carga se puede indicar por la inserción de un indicador numérico di-, tri-, etc. entre el nombre hidruro e ido-.

<i>Anión (Nota 4d)</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
NH_2^-	Asando	amido
NH^{2-}	azanediido azanido(2-)	imido
N^{3-}	Nitrido	
N_2H_3^-	diazanido	hidrazido
$\text{N}_2\text{H}_2^{2-}$	diazanediido diazanido(2-)	hidrazido(2-)
N_2H^{3-}	diazanetriido diazanido(3-)	hidrazido(3-)
N_2^{4-}	Dinitrido(4-)	
N_2H^-	diazenido	
N_2^{2-}	Dinitrido(2-)	
N_3^-	Trinitrido(1-)	azido

Tabla II-4.3 Nombres de aniones derivados de los hidruros principales por pérdida de uno o más hidronios.

II-4.5 LIGANDOS

II-4.5.1 General

Generalmente no hay ambigüedad o dificultad para nombrar a los ligandos derivados de los de nitrógeno cuando ellos ocurren en los compuestos metálicos del grupo principal, donde la situación de enlace está bien definida. En estos compuestos las ideas convencionales de valencia o estados formales de oxidación normalmente conducen a una elección equívoca de los nombres basados en las estructuras.

En los compuestos de metales de transición el ligando a menudo está en una instancia intermedia entre los estados de enlace formales de valencia y el estado de oxidación formal no está definido. Así, el ligando N_2H_3 se puede considerar formalmente como NH_2NH^- (llevando una carga negativa) ó $\text{NH}_2=\text{NH}^+$ (llevando una carga positiva). No hay una situación inequívoca y por ello se debe hacer una elección arbitraria a los fines de la nomenclatura. A los efectos de la indexación y la disponibilidad de la información es importante que el ligando siempre tenga el mismo nombre independientemente de si las ideas convencionales del estado de oxidación indican otra cosa.

Se emplea el siguiente orden de prioridades para determinar el nombre del ligando:

- (i) si es posible, nombrar al ligando como una molécula neutra que no sea un zwitterion, un radical o un diradical;

Nota 4d : Cuando el anión no contiene hidrógenos reemplazables, no son necesarios los nombres sustitutivos, y aquellos derivados del nombre del elemento son los preferidos. Sin embargo, los nombres sustitutivos deberían ser: N^{3-} azanetriido, N_2^{4-} diazanetraido, N_2^{2-} diazenediido. N_3^- no tiene nombre sustitutivo aprobado.

- (ii) si (i) no es posible, nombrarlo como un ligando aniónico con el menor número posible de cargas formales;
- (iii) si no se puede nombrar de acuerdo a (i) ó (ii), nombrarlo como un ligando zwitteriónico con una carga total de cero o, si esto no se puede hacer, como con la menor carga negativa posible;
- (iv) si ninguna de las opciones previas es posible, nombrar al ligando como uno del tipo catiónico.

Algunos ligandos derivados de esqueleto dinitrógeno tienen hasta tres nombres sistemáticos dependiendo del compuesto generatriz escogido para su derivación. La aplicación de las reglas anteriores limita la elección a un generador para cada ligando N_2H_x ($x = 0-5$).

II-4.5.2 Hidruros de nitrógeno y sus cationes como ligandos

Los nombres de los ligandos son los mismos que aquellos de los hidruros y los cationes a partir de los cuales ellos se derivan con la excepción del amoníaco que brinda al ligando el nombre amino (Sección I-10.4.5.5 de la Nota 4a).

En el pasado los puntos de unión del ligando eran indicados por agregado del sufijo en bastardillas del símbolo del átomo(s) ligante al nombre del ligando (Sección I-10.6.2.1 de la Nota 4a). Sin embargo, la convención kapa, κ , (Sección I-10.6.2.2 de la Nota 4a), provee de un sistema más general para indicar los puntos de ligadura y en casos más complicados puede ser preferible al "símbolo átomo donador" descrito más arriba (Nota 4e). Los ligandos en sus diferentes situaciones de enlace están dadas en la Tabla II-4.4.

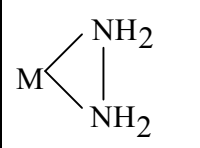
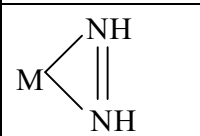
<i>Ligando unido</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
M-NH ₃	Azano	amino
M-NH ₂ -NH ₂	diazano- <i>N</i> diazano- κN	hidrazina- <i>N</i>
	diazano- <i>N,N'</i> diazano- $\kappa^2 N,N'$	hidrazina- <i>N,N'</i>
M-NH=NH	diazeno- <i>N</i>	
	diazene- <i>N,N'</i> diazene- $\kappa^2 N,N'$	
M-NH ₂ -NH ₂ -M	μ -diazano- <i>N,N'</i> μ -diazano- $1\kappa N:2\kappa N'$	
M-NH=NH-M	μ -diazeno- <i>N,N'</i>	
M-N ₃ H	trinitrido de hidrógeno	Azida de hidrógeno

Tabla II-4.4 Denominación de los ligandos

Nota 4e : En la mayoría de los ligandos de hidruros de nitrógeno la convención kapa no es significativamente más útil que el "símbolo átomo donador".

La información estereoquímica en el nombre del complejo es provista por el uso de los símbolos poliédricos y los índices de configuración (Secciones I-10.5 y I-10.6.3. de la Nota 4a).

Ejemplos:



sulfato de tetraaminocobre(II)



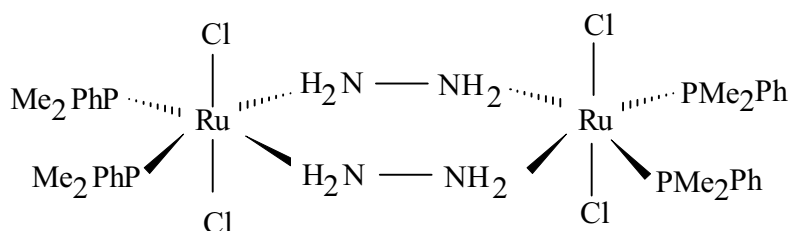
dibromo(diazeno-N)bis[etano-1,2-dilbis(difenilfosfano-P)]tungsteno (II) (ver Nota 4f^{Nota 4f})



μ -diazeno-1 $\kappa N, N'$ -bis[dicarbonil(η -ciclopentadienil)manganeso(I)], ó

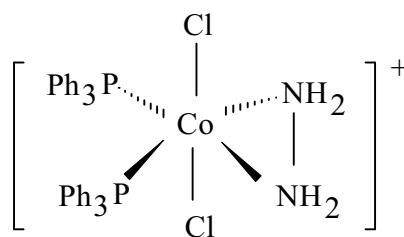
μ -diazeno-1 $\kappa N:2\kappa N'$ -bis[dicarbonil(η -ciclopentadienil)manganeso(I)]

4.



bis(μ -diazeno- N, N')bis[diclorobis(dimetilfenilfosfano)rutenio(II)], ó
bis(μ -diazeno-1 $\kappa N:2\kappa N'$)bis[diclorobis(dimetilfenilfosfano)rutenio(II)]

5.



(OC-6-12)-dicloro(diazeno- N, N')bis(trifenilfosfano)cobalto(1+)

II-4.5.3 Ligandos formalmente derivados de los hidruros de nitrógeno por pérdida de uno o más hidronios

Estos ligandos poseen la misma fórmula como los correspondientes aniones. Sus nombres son sistemáticamente derivados de aquellos de los correspondientes aniones por reemplazo de la *e* final del nombre del anión por *o*. El punto de ligadura del ligando se indica por medio del uso de la convención *kappa*. Cuando son posibles derivaciones

Nota 4f : El ligando diterciario fosfano también se puede nombrar 1,2bis(difenilfosfino-P)etano.

alternativas, la elección se hace de acuerdo a lo indicado en la Sección II-4.5.1. Algunas situaciones simples de enlace se muestran en las Tablas II-4.5, II-4.6 y II-4.7.

El ligando obtenido por remoción de todos los átomos de hidrógeno del diazano (hidrazina) se puede llamar dinitrógeno, dinitrido(2-) ó dinitrido(4-) de acuerdo a su carga formal. En ausencia de otra evidencia se emplea el nombre dinitrógeno (Sección II-4.5.1).

Ejemplos:

1. $[\text{MoCl}(\text{NH})(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2)_2]$
azanediidoclorobis[etano-1,2-dilbis(difenilfosfano-P)]molibdeno (III)
2. $\text{K}_2[\text{OsCl}_5\text{N}]$
pentacloronitridoosmiato(2-) de potasio
3. $[\text{Mo}(\text{NNH}_2)\text{O}(\text{S}_2\text{CNMe}_2)_2]$
(diazanediido-*N*)bis(*N,N'*-dimetilditiocarbamato)oxomolibdeno(VI)
4. $[\text{Ir}_3(\mu_3\text{-N})(\text{SO}_4)_6(\text{H}_2\text{O})_3]^{3-}$
 μ_3 -nitridotri[acuabis(sulfato)iridato](3-)
5. $[\text{CoH}(\text{N}_2)(\text{PPh}_3)_3]$
(dinitrógeno-*N*)hidridotris(trifenilfosfano)cobalto(I)

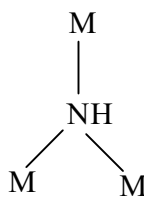
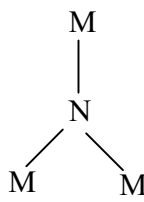
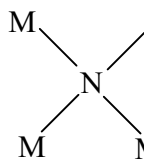
Ligando unido	Nombre sistemático	Nombre alternativo
M-NH ₂	Asando	amido
M=NH	Azanediido	imido
M≡N	Nitrido	
M-NH ₂ -M	μ -azanido	μ -amido
M-NH-M	μ -azanediido	μ -imido
M-N=M	μ -nitrido	
	μ_3 -azanediido	μ_3 -imido
	μ_3 -nitrido	
	μ_4 -nitrido	

Tabla II-4.5 Nombres de los ligandos aniónicos derivados del amoniaco (ver Nota 4g)

Nota 4g : Sólo se muestran las estructuras formales más simples. En los compuestos de metales de transición los órdenes de enlace pueden ser más altos que los mostrados.

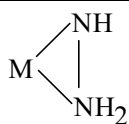
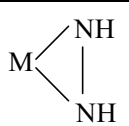
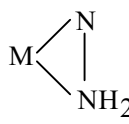
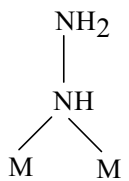
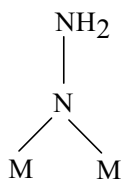
<i>Ligando unido</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
M-NH-NH ₂	diazanido- <i>N</i>	hidrazido- <i>N</i>
	diazanido- <i>N,N'</i>	hidrazido- <i>N,N'</i>
M=N-NH ₂	Diazanediido- <i>N</i>	hidrazinediido- <i>N</i>
	diazanido(2-)- <i>N,N'</i> diazene- <i>N,N'</i> (Nota 4h)	hidrazido(2-)- <i>N</i>
	diazanediido- <i>N,N'</i> diazanido(2-)- <i>N,N'</i>	hidrazinediido- <i>N,N'</i> hidrazido(2-)- <i>N,N'</i>
M-NH-NH ₂ -M	μ -diazanido- <i>N,N'</i>	
M-NH-NH-M	μ -diazene- <i>N,N'</i> (Nota 4h)	
M=N-NH ₂ -M	μ -diazanediido- <i>N,N'</i>	
	μ -diazanido	
	μ -diazanediido- <i>N</i>	

Tabla II-4.6 Nombres de los ligandos aniónicos derivados del diazano (hidrazina)

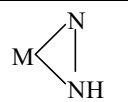
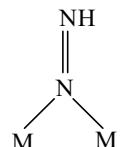
<i>Ligando unido</i>	<i>Nombre sistemático</i>
M-N=N-H	diazenido- <i>N</i>
	diazenido- <i>N,N'</i>
	μ -diazenido- <i>N</i>
M-N=NH-M	μ -diazenido- <i>N,N'</i>

Tabla II-4.7 Nombres de ligandos aniónicos derivados del diazene (ver también Nota 4h)

II-4.5.4 Ligandos derivados de los monocaciones de hidruros de nitrógeno por pérdida de uno o más hidronios del centro no cargado de nitrógeno

Los ligandos derivados de los cationes de hidruros de nitrógeno se nombran por adición del sufijo *-ido* al nombre del catión (ver Tabla II-4.8). El número de carga se usa para indicar la carga formal total sobre el ligando, incluyendo cero y una unidad de carga negativa.

<i>Ligando unido</i>	<i>Nombre sistemático</i>	<i>Nombre alternativo</i>
$M-NH-NH_3^+$	diazaniumido(0)	hidraziniumido(0)
$M=N-NH_3^+$	diazaniumido(1-)	hidraziniumido(1-)
$\left[\begin{array}{c} NH_3 \\ \\ N \\ / \quad \backslash \\ M \quad \quad M \end{array} \right]^+$	μ -diazaniumido(0)	μ -hidraziniumido(0)
$\left[\begin{array}{c} NH_3 \\ \\ N \\ / \quad \backslash \\ M \quad \quad M \end{array} \right]^+$	μ -diazaniumido(1-)	μ -hidraziniumido(1-)
$\left[\begin{array}{c} M \quad \quad NH_3 \\ \backslash \quad / \\ N \\ / \quad \backslash \\ M \quad \quad M \end{array} \right]^+$	μ_3 -diazaniumido(1-)	μ_3 -hidraziniumido(1-)
$M-N=NH_2^+$	diazeniumido(0) diazanido(2-) (Nota 4i)	

Tabla II-4.8 Nombres de ligandos derivados de los cationes de hidruros de nitrógeno

II-4.6 DERIVADOS ORGÁNICOS DE LOS LIGANDOS DE HIDRUROS DE NITRÓGENO

Los derivados orgánicos se nombran como productos de sustitución de los originales que han sido denominados como se describe en las Secciones II-4.1 a II-4.5. Cuando el compuesto contiene dos átomos de nitrógenos contiguos ellos pueden ser designados por N^1 y N^2 . En los ligandos donde ambos átomos de nitrógeno no llevan carga formal o cuando ellos llevan iguales cargas formales, se asigna el número 1 al átomo de nitrógeno que lleva mayor número de sustituyentes. Cuando cada nitrógeno tiene el mismo número de sustituyentes, aquel con el sustituyente de menor orden alfabético se numera con

Nota 4h : El diazanido(2-) simétrico y todos los ligandos diazanido(3-) se nombran como derivados del diazeno (ver Tabla II-4.4)

Nota 4i : El ligando $-N=NH_2$ y otros ligandos diazeniumido se nombran normalmente como derivados de la hidrazina (ver Tabla II-4.6).

1. El átomo metálico no se cuenta como un sustituyente para estos propósitos. En ligandos que contienen formalmente un nitrógeno cargado negativamente (ver Sección II-4.5), así como un nitrógeno neutro o positivamente cargado, el nitrógeno aniónico se designa con el número 1. Si ambos átomos de nitrógeno llevan iguales cargas formales negativas, aquel llevando la mayor carga negativa tiene prioridad para el número 1 (ver Capítulos C-8 y C-9 de la Nota 4c para sustituciones más complejas).

<i>Ligando unido</i>	<i>Nombre del ligando</i>
M-N=N-C ₆ H ₅	2-fenildiazenido- <i>N</i> ¹
M=N-N(CH ₃) ₂	2,2-dimetildiazanido(2-)- <i>N</i> ¹
M-N(CH ₃)=N(C ₂ H ₅)	1-etil-2-2metildiazene- <i>N</i> ²
M-N(CH ₃)-N(C ₂ H ₅)(C ₃ H ₇)	1-etil-2-metil-1-propildiazanido- <i>N</i> ²
M-N(CH ₃)-N(CH ₃) ₂ H ⁺	1,2,2-trimetildiazaniumido(0)- <i>N</i> ¹
M-NH(CH ₃)-N(CH ₃) ₂	1,1,2-trimetildiazane- <i>N</i> ¹
M-NH=N(CH ₃)-M	μ-1-metildiazene- <i>N</i> ¹ <i>N</i> ²

Tabla II-4.9 Ejemplos de uniones de ligandos sustituidos de hidruros de nitrógeno

Ejemplos:

- $$\begin{array}{c} \text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3 \\ | \\ \text{Cl} - \text{Pt} - \text{N} = \text{N} - \text{Ph} \\ | \\ \text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3 \end{array}$$

trans-cloro(2-fenildiazenido-*N*¹)bis-(trietilfosfano)platino(II)
(ver Nota 1b, p.10)
- [WBr₂{=N-N(CH₃)₂}Ph₂PCH₂CH₂PPh₂]₂

dibromo[2,2-dimetildiazanido(2-)-*N*¹]bis(etano-1,2-dilbis(difenilfosfano-P)]-tungsteno(IV)
- $$\left[\left[\begin{array}{c} \text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3 \\ | \\ \text{Cl} - \text{Pt} - \overset{\text{H}}{\text{N}} = \text{N} - \text{Ph} \\ | \\ \text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3 \end{array} \right] \right] \text{Cl}$$

Cloruro de *trans*-cloro(1-fenildiazenido-*N*²)bis-(trietilfosfano) platino(II)

II-5 Compuestos Cadena y Anillo Inorgánicos

CONTENIDOS

II-5.1 Introducción

II-5.2 Compuestos tipo cadena no ramificada y monociclos

II-5.2.1 Compuestos en cadena

II-5.2.1.1 General

II-5.2.1.2 Elección de la cadena principal

II-5.2.1.3 Numeración de las cadenas

II-5.2.1.4 Construcción del nombre

II-5.2.1.5 Cationes

II-5.2.1.6 Aniones

II-5.2.1.6.1 Cadenas aniónicas

II-5.2.1.6.2 Nombre del ligando aniónico

II-5.2.2 Compuestos monocíclicos

II-5.2.2.1 Numeración de los átomos en los anillos

II-5.2.2.1.1 Elección de la posición uno

II-5.2.2.1.2 Dirección de la numeración

II-5.2.2.1.3 Procedimiento de numeración

II-5.2.2.2 Compuestos anulares monocíclicos catiónicos

II-5.2.2.3 Compuestos anulares monocíclicos aniónicos

II-5.3 Compuestos policíclicos y cadenas ramificadas

II-5.3.1 Introducción

II-5.3.2 El descriptor nodal

II-5.3.2.1 Definiciones básicas

II-5.3.2.2 La numeración de los nodos

II-5.3.2.2.1 Consideraciones generales

II-5.3.2.2.2 Grafos acíclicos

II-5.3.2.2.3 Grafos monocíclicos

II-5.3.2.2.4 Grafos policíclicos

II-5.3.2.2.5 Arreglos

II-5.3.2.3 Descriptor

II-5.3.2.3.1 Grafos acíclicos

II-5.3.2.3.2 Grafos cíclicos

II-5.3.2.3.3 Arreglos

II-5.3.3 Construcción del nombre

II-5.3.3.1 Consideraciones generales

II-5.3.3.2 Ligandos

II-5.3.3.3 La construcción del nombre

II-5.3.3.3.1 Compuestos acíclicos ramificados

II-5.3.3.3.2 Compuestos policíclicos

II-5.3.3.3.3 Arreglos

II-5.3.3.3.4 Compuestos tipo caja

II-5.3.3.3.5 Especies iónicas y ligandos

II-5.3.3.3.6 Compuestos de coordinación

II-5.4 Conclusión

II-5.1 INTRODUCCIÓN

Este capítulo está dedicado a la aproximación sistemática para nombrar los compuestos tipo cadena y anillos inorgánicos, los cuales poseen una larga historia (Nota 5a). Ello está basado en la nomenclatura aditiva y así no requiere ninguna clase de conocimiento previo acerca de la naturaleza de los enlaces entre los átomos. Aunque el método puede ser aplicado a todos los compuestos, su uso está orientado a los compuestos inorgánicos que están principalmente compuestos por átomos distintos al carbono.

Un compuesto neutro en cadena se llama catena y uno cíclico neutro se denomina ciclo. Los correspondientes cations se llaman catenio y ciclio y los aniones catenato y ciclato. El número de átomos en la cadena o en el anillo está dado por el descriptor $[n]$ puesto inmediatamente antes que el término catena o ciclo precedido por un guión.

Las reglas específicas son necesarias para la elección y numeración de la cadena principal o anillo en la molécula. Los elementos que constituyen la estructura de la cadena o el anillo se listan en orden alfabético completo con sus localizantes y son nombrados modificando los nombres de los grupos sustituyentes del elemento dados en la Tabla VII de la Nota 5b sustituyendo la terminación *-io* por *-i* (ver Tabla II-5.1). Todos los átomos (incluyendo el hidrógeno) o grupos de átomos que no forman parte de la estructura de la cadena o del anillo se denominan como ligandos. Ellos también están listados en orden alfabético antes de los términos de la secuencia citada de los átomos de la cadena o el anillo.

II-5.2 CADENA NO RAMIFICADA Y COMPUESTOS MONOCÍCLICOS

II-5.2.1 Compuestos en cadena

II-5.2.1.1 General

En algunos casos es conveniente tratar al compuesto en cadena como no ramificado. Entonces, las moléculas pueden ser descritas definiendo un cadena principal. Todas las ramas enlazadas a la cadena principal se nombran como ligandos. El número de átomos en la cadena principal se da por el descriptor $[n]$ puesto inmediatamente antes que el término catena y precedido por un guión. Así, una cadena con seis miembros es una $-[6]$ catena. La longitud de la cadena se define como la cadena más larga de átomos en una molécula, dejando de lado los átomos terminales de hidrógeno. Los átomos de hidrógeno terminales se nombran como ligandos (ver Sección II-5.2.1.4).

Ejemplo:

1. HS-S-S-SH : 1,4-dihidrotetrasulfi-[4]catena

Nota 5a : La historia de la denominación de los compuestos en cadena y anillo inorgánicos ha sido reseñada por I. Haiduc en *The Chemistry of Inorganic Ring Systems* (R. Steudel, ed.), pp.451-477, Elsevier, Amsterdam, 1992, y por W. H. Powell y T. E. Sloan *Phosphorous, Sulfur, Silicon and Related Elements*, **41**, 183 (1989).

Nota 5b : *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.

Símbolo	Nombre	Símbolo	Nombre	Símbolo	Nombre
Ac	actini	Ge	germi*	Pr	praseodimi
Ag	argenti	Gd	gadolini	Pt	Platini
Al	alumini	H	hidroni	Pu	Plutoni
Am	americici	He	heli	Ra	Radi
Ar	argoni	Hg	mercuri	Rb	Rubidi
As	arsi*	Ho	olmy	Re	Reni
At	astati	I	iodi	Rh	Rodi
Au	auri	In	indi	Ru	Ruteni
B	bori	Ir	iridi	S	Sulfi
Ba	bari	K	potasi	Sb	Estibi
Be	berili	Kr	kriptoni	Sc	Escandi
Bi	bismi	La	lantani	Se	Seleni
Bk	berkeli	Li	liti	Si	Sili
Br	bromi	Lr	laurenci	Sm	Samari
C	carbi*	Lu	luteti	Sn	Estani
Ca	calci	Md	mendelevi	Sr	Estronti
Cd	cadmi	Mg	magnesi	T	Triti
Ce	ceri	Mn	mangani	Ta	Tantali
Cf	californi	Mo	molibdi	Tb	Terbi
Cl	clori	N	azi	Tc	Tecneti
Cm	curi	Na	sodi	Te	Teluri
Co	cobalti	Nb	niobi	Th	Tori
Cr	cromi	Nd	neodimi	Ti	Titani
Cs	cesi	Ne	neoni	Tl	Tali
Cu	cupri	Ni	niqueli	Tm	Tuli
D	deuteri	No	nobeli	U	Urani
Dy	disprosi	Np	neptuni	V	Vanadi
Er	erbi	O	oxi	W	wolfram
Es	einsteni	Os	osmi	Xe	Xenoni
Eu	europi	P	fosfi	Y	Itri
F	fluori	Pa	protactini	Yb	Iterbi
Fe	ferri	Pb	plumbi	Zn	Zinqui
Fm	fermi	Pd	paladi	Zr	Zirconi
Fr	franci	Pm	prometi		
Ga	gali	Po	poloni		

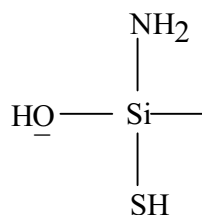
*Tabla II-5.1 Los nombres de los elementos constituyendo la cadena principal. * Los nombres no deri van directamente de los nombres del grupo sustituyente.*

II-5.2.1.2 Elección de la cadena principal

Si un átomo de una cadena colocado en la penúltima posición está unido a más de un átomo diferente al hidrógeno, el átomo terminal escogido es el primero encontrado en la secuencia de elementos en la Tabla II-1.

Ejemplos:

1.

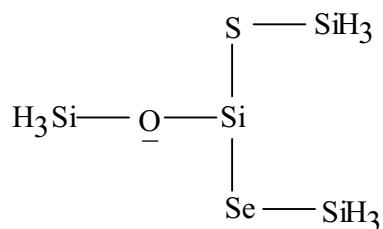


El oxígeno aparece primero en la secuencia y es preferido sobre el azufre y al nitrógeno. Entonces, O es una parte de la cadena.

Si los átomos terminales de las cadenas ramificadas son idénticos, la elección de la cadena principal se decide por comparación de los penúltimos átomos o, si ellos son idénticos, en el primer punto de diferencia moviéndose en forma interior.

Ejemplo:

2.

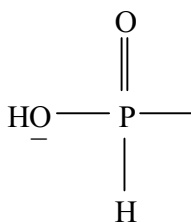


Se prefiere el O en relación con el S y el Se.

Si el penúltimo átomo está unido a dos átomos idénticos o las ramas contienen secuencias de átomos idénticos pero difieren en los números de coordinación de algunos de los átomos, la cadena principal debería contener al elemento con mayor número de coordinación.

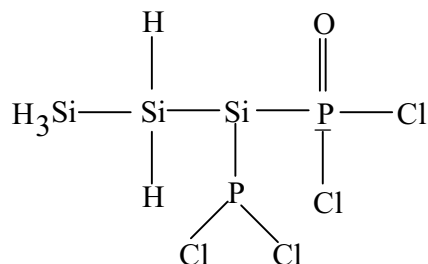
Ejemplo

3.



El oxígeno con número de coordinación 2 es preferido en vez del oxígeno con número de coordinación 1.

4.



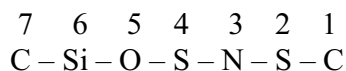
El fósforo con número de coordinación 4 es el preferido al fósforo con número de coordinación 3.

II-5.2.1.3 Numeración de cadenas

La cadena es numerada desde el fin que asigna un localizante más bajo, en el primer punto de diferencia, a los elementos primer encontrados en la secuencia de la Tabla II-1.

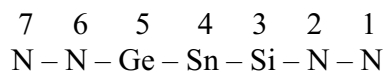
Ejemplos:

1.



La dirección de la numeración está gobernada por la elección del átomo en la posición 2. El S es preferible al Si.

2.

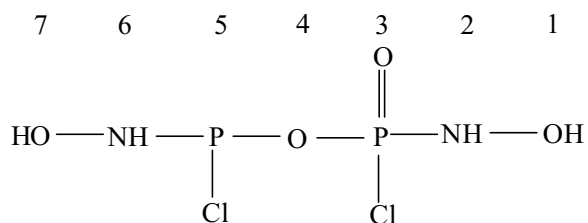


La dirección está gobernada por la elección del átomo en la posición 2. El Si es preferible al Ge.

En las cadenas que son simétricas con respecto al átomo(s) central, éstas se numeran desde el extremo que asigna un localizante más bajo, en el primer punto de diferencia, al elemento con el mayor número de coordinación. En el caso de iguales números de coordinación los ligandos con átomos donores apareciendo primero en la Tabla II-1 tienen preferencia. En el caso de ligandos poliatómicos el primer átomo diferencial que aparece primero en la Tabla II-1 tiene preferencia.

Ejemplo:

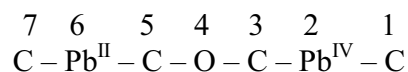
3.



Los puntos de diferencia también son átomos de un elemento en distintos estados de oxidación. El átomo en el mayor estado de oxidación es preferido respecto del mismo en el estado de oxidación menor.

Ejemplo:

4.



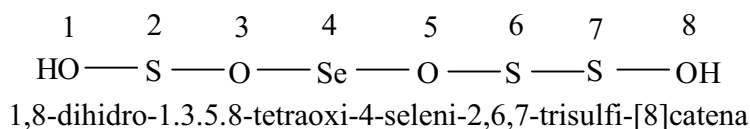
El Pb^{IV} es preferido al Pb^{II} .

II-5.2.1.4 Construcción del nombre

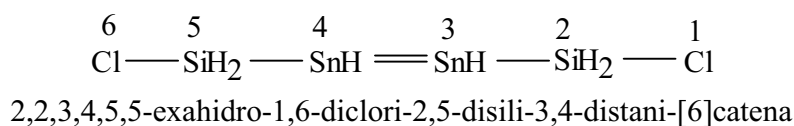
El nombre de una cadena principal se construye citando una serie de *i*-términos indicando la presencia de cada átomo en la cadena. Los *i*-términos se ordenan alfabéticamente provistos de localizantes y prefijos multiplicativos, di- tri-, tetra-, etc., apropiados. Todos los átomos o grupos de átomos que no se consideren como parte de la cadena principal (incluyendo el hidrógeno) se nombran como ligandos de acuerdo a los principios de la nomenclatura de coordinación, y se listan juntos con sus localizantes en orden alfabético antes de la secuencia citada de los términos de átomos de la cadena. Las cadenas laterales de sustituyentes hidrocarbonados comunes se denotan por los nombres de sustituyentes usuales, por ejemplo metil.

Ejemplos:

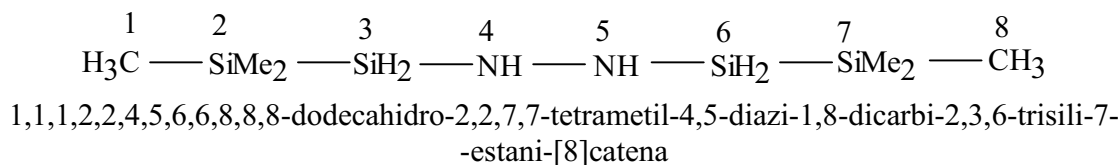
1.



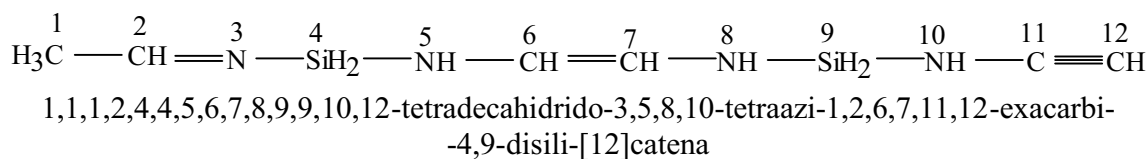
2.



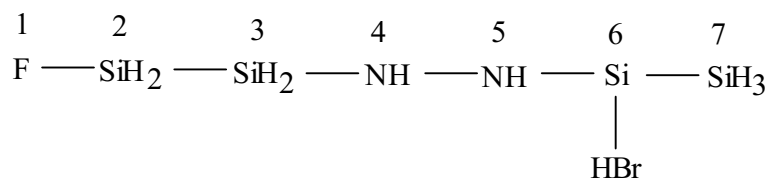
3.



4.

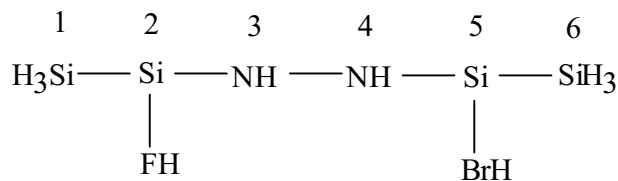


5.



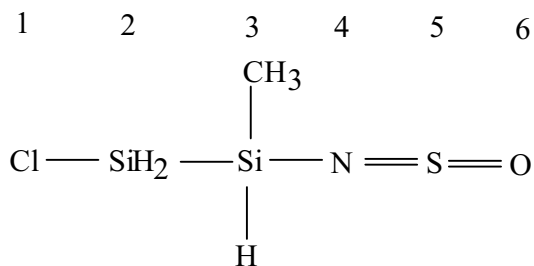
6-bromo-2,2,3,3,4,5,6,7,7,7-decahidrido-4,5,-diazi-1-fluori-2,3,6,7-tetrasili-[7]catena

6.



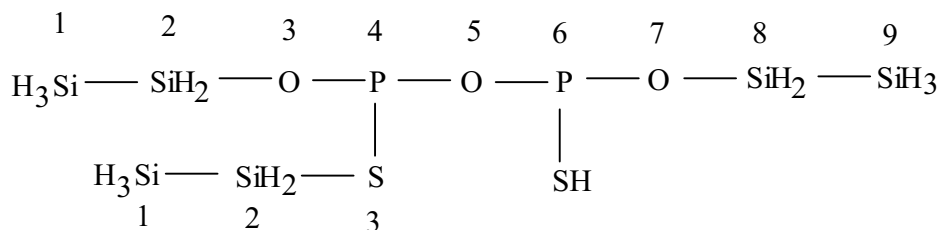
5-bromo-2-fluoro-1,1,1,2,3,4,5,6,6-decahidrido-3,4diazio-1,2,5,6-tetrasil-[6]catena

7.



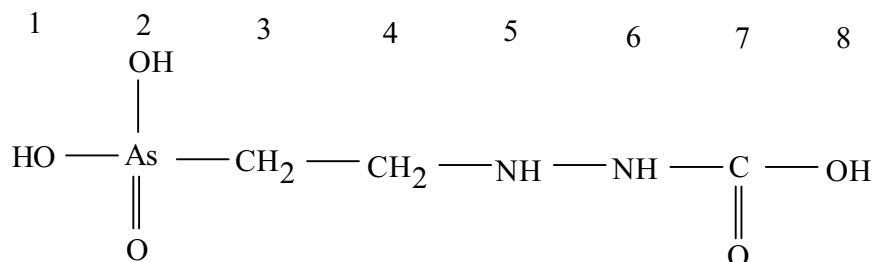
2,2,3-trihidrido-3-metil-4-azi-1-clori-6-oxi-2,3-disili-5-sulfil-[6]catena

8.



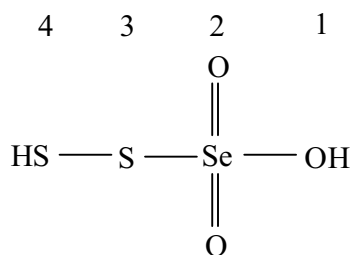
1,1,1,2,2,8,8,9,9,9-decahidrido-4-{2,2,3,3,3-pentahidrido-2,3-disili-1-sulfi-[3]caten-1-ato}-6-sulfanido-3,5,7-trioxi-4,6-difosfi-1,2,8,9-tetrasil-[9]catena (ver Nota 1b, p.10)

9.



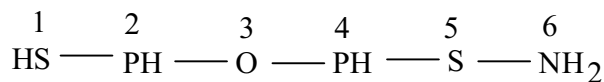
1,3,3,4,4,5,6,8-octahidro-2-didroxo-2,7-dioxo-2-arsi-5,6-diazio-3,4,7-tricarby-1,8-dioxi-[8]catena

10.



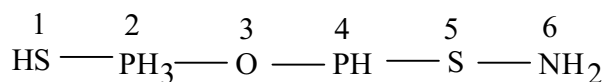
1,4-dihidro-2,2-dioxo-1-oxi-2-seleni-3,4-disulfi-[4]catena

11.



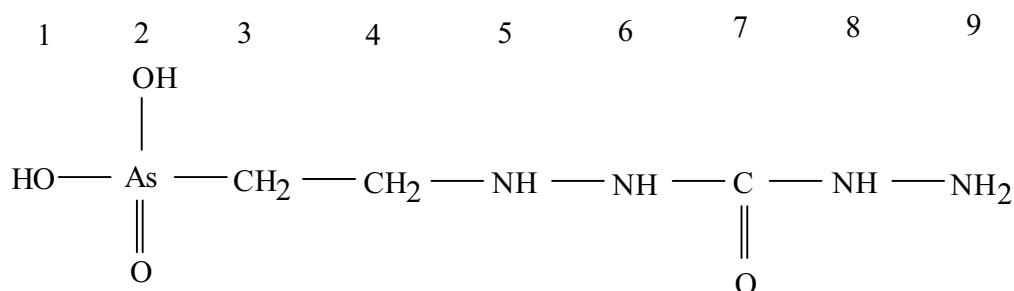
1,2,4,6,6-pentahidro-6-azi-3-oxi-2,4-difosfi-1,5-disulfi-[6]catena

12.



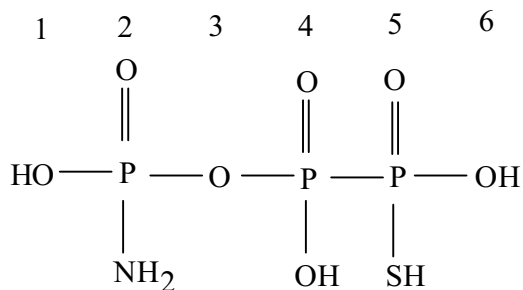
1,2,2,2,4,6,6-heptahidrido-6-azi-3-oxi-2,4-difosfi-1,5-disulfi-[6]catena

13.



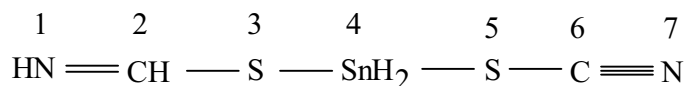
1,3,3,4,4,5,6,8,9,9-decahidro-2-hidroxo-2,7-dioxo-2-arsi-5,6,8,9-tetraazi-3,4,7-tricarbi-1-oxi-[9]catena

14.



2-amido-1,6-dihidrido-4-hidroxo-2,4,5-trioxo-5-sulfanido-1,3,6-trioxi-2,4,5-trifosfi-[6]catena

15.



1,2,4,4-tetrahidrido-1,7-diazi-2,6-dicarbi-4-estani(IV)-3,5-disulfi-[7]catena

Cuando los átomos metálicos están presentes en la cadena deberían darse sus estados de oxidación, es decir, el número de oxidación del metal se indica por un número romano colocado entre paréntesis inmediatamente después del nombre del elemento. Para cero se usa el símbolo 0. Algunos ejemplos son cromi(II), cromi(III), cromi(0), etc. Cuando se usan

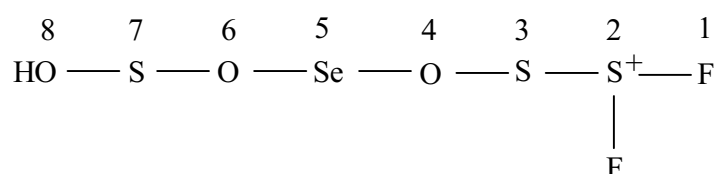
conjuntamente con los símbolos, los números romanos se colocan como un superíndice a la derecha (ver Ejemplo 3 de la Sección II-5.2.1.6.1).

II-5.2.1.5 Cationes

Las cadenas catiónicas se nombran como iones catenios. La carga de los cationes se indica por un número arábigo seguido por el signo "+" colocado entre paréntesis, siguiendo la terminación *-io*. La localización de la carga en el esqueleto de la cadena se puede indicar por un localizante antes de la terminación *-io*.

Ejemplos:

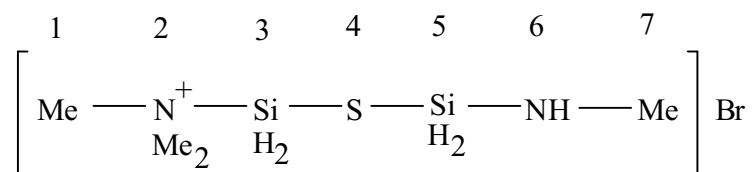
1.



2-fluoro-8-hidrido-1-1-fluoro-4,6,8-trioxi-5-seleni-2,3,7-trisulfi-[8]catenio(1+),
ó

2-fluoro-8-didrido-1-fluoro-4,6,8-trioxi-5-seleni-2,3,7-trisulfi-[8]caten-2-io(1+)

2.



bromuro de 1,1,1,3,3,5,5,6,7,7,7-undecahidro-2,2-dimetil-2,6-diazi-1,7-dicarbi-3,5-disili-4-sulfi-[7]catenio(1+),
ó

bromuro de 1,1,1,3,3,5,5,6,7,7,7-undecahidro-2,2-dimetil-2,6-diazi-1,7-dicarbi-3,5-disili-4-sulfi-[7]caten-2-io(1+)

Si la posición de la carga positiva de un ion catenio es incierta el compuesto se designa simplemente como un ion catenio.

Ejemplos:

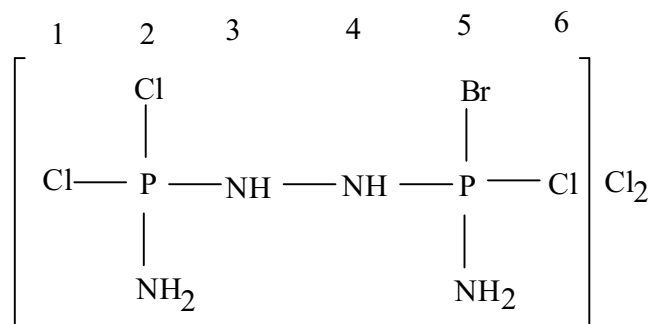
3. [H₂N-PPh₂-N-PPh₂-NH₂]Cl

cloruro de 1,1,5,5-tetrahidrido-2,2,4,4-tetrafenil-1,3,5-triazi-2,4-difosfi-[5]catenio(1+)

4. [Cl-P(NH₂)Cl-N-P(NH₂)Cl-Cl]Cl

cloruro de 2,4-diamido-2,4-dicloro-3-azi-1,5-dicloro-2,4-difosfi-[5]catenio(1+)

5.



dicloruro de 2,5-diamido-5-bromo-2-cloro-3,4-dihidrido-3,4-diazi-1,6-dicloro-2,5-difosfi-
-[6]catenio(2+)

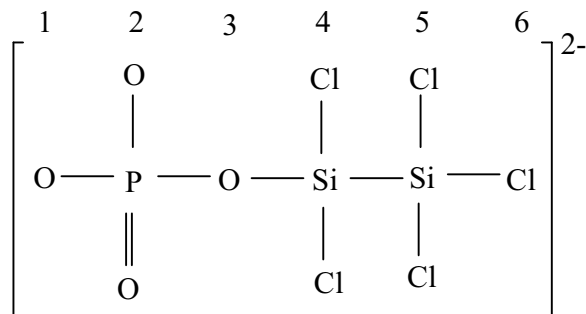
II-5.2.1.6 Aniones

II-5.2.1.6.1 Cadenas aniónicas

Las cadenas aniónicas se nombran como iones catenato. La carga del anión, indicada por un número arábigo seguido por el signo menos, se coloca entre paréntesis seguidos por la terminación *-ato*. La localización de la carga en el esqueleto de la cadena se puede indicar por un localizante antes de la terminación *-ato*.

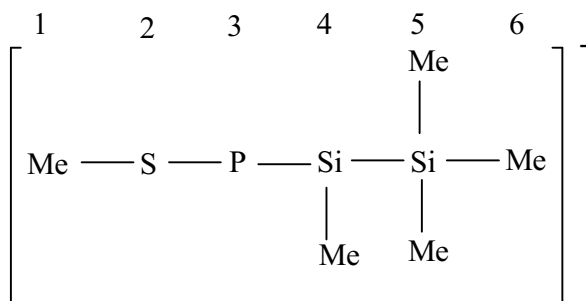
Ejemplos:

1.



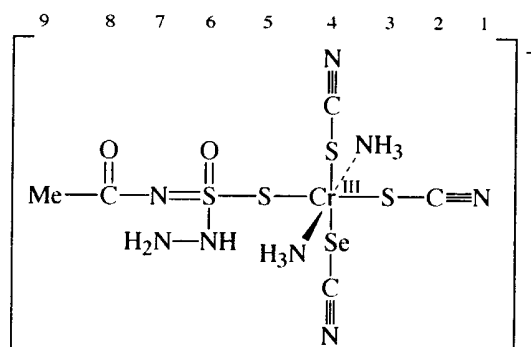
2,2,3,3-tetracloro-5,5-dioxo-1-cloro-4,6-dioxi-5-fosfi-2,3-disili-[6]catenato(2-)

2.



1,1,1,6,6,6-hexahidrido-4,5,5-trimetil-4-azi-1,6-dicarbi-3-fosfi-5-sili-2-sulfi-[6]caten-3-
-ato(1-)

3.



4,4-diamin-6-hidrazido-9,9,9-trihidrido-6,8-dioxo-4-selenocianato-4-tiocianato-1,7-diazi-
-2,8,9-tricarbi-4-cromi(III)-3,5,6-trisulfi-[9]catenato(1-)

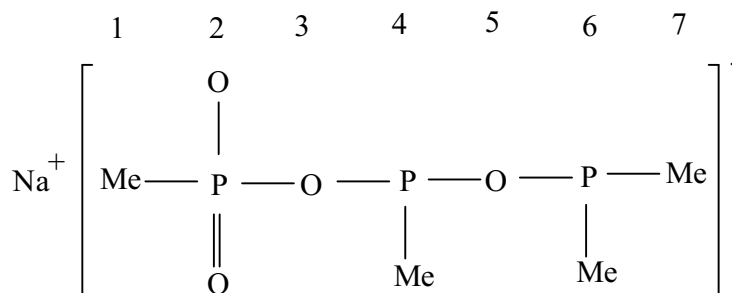
ó

4,4-diamin-4-(3-azi-2-carbi-1-seleni-[3]caten-1-ato)-4-(3-azi-2-carbi-1-sulfi-[3]catena-1-
-ato)-6-hidrazido-9,9,9-trihidrido-6,8-dioxo-1,7-diazi-2,8,9-tricarbi-4-cromi(III)-3,5,6-
-trisulfi-[9]caten-4-ato(1-)

Si la posición de la carga negativa de un ión catenato es incierta, se designa simplemente como un ión catenato.

Ejemplo:

4.



sodio1,1,1,7,7,7-exahidro-4,6-dimetil-2,2-dioxo-1,7-dicarbi-3,5-dioxi-2,4,6-trifosfi-
-[7]catenato

II-5.2.1.6.2 Nombre del ligando aniónico.

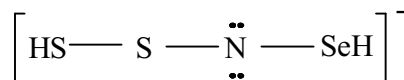
Los ligandos derivados de las cadenas por pérdida de hidrones se dan con la terminación *-ato*. La localización de la carga se puede indicar con un localizante puesto antes de la finalización.

Ejemplos:

1. [H₃Si-SiH₂-S]⁻

2,2,3,3,3-pentahidrido-2,3-disili-1-sulfi-[3]caten-1-ato

2.



1,4-dihidrido-3-azi-4-seleni-1,2-disulfi-[4]caten-3-ato

II-5.2.2 Compuestos monocíclicos

La nomenclatura que sigue suministra nombres para compuestos tipo anillos inorgánicos consistentes principalmente de elementos distintos al carbono. Los sistemas anulares conteniendo dos o más átomos de carbono sucesivos usualmente se nombran de acuerdo a las reglas de la Nota 5c.

Un compuesto tipo anillo monocíclico neutro se denomina ciclo, un anión se denomina ión ciclato, y un catión es nombrado como ión ciclo. El número de átomos en el anillo está dado por un indicador [*n*] colocado inmediatamente antes que el término ciclo, ciclato o ciclo, y está precedido por un guión. Así, un anillo de seis miembros es un -[6]ciclo. A los fines de enfatizar la estructura cíclica con el descriptor es aceptable usar un cero antes del número arábigo, es decir, -[06]ciclo (ver Sección II-5.3.2.3.2).

Los nombres de los derivados de los ciclos se forman con el nombre del ciclo usando la nomenclatura de coordinación (ver Capítulos I-7 y I-10 de la Nota 5b). Todos los ligandos, incluyendo al hidrógeno, se nombran por medio de la nomenclatura de coordinación y están listados en orden alfabético.

II-5.2.2.1 Numeración de los átomos anulares

II-5.2.2.1.1 Elección de la posición uno

- (a) Los elementos que constituyen el anillo se nombran de acuerdo a la Tabla VII de la Nota 5b por sustitución de la terminación *-io* por *i* (ver Tabla II-5.1) y son listados en orden alfabético.
- (b) La numeración comienza en el átomo que está listado primero en la Tabla II-1.
- (c) Si dos o más átomos de la mayor prioridad son miembros del anillo, aquél con el vecino que sigue en orden en la Tabla II-1 es el inicial. Si esta segunda operación no define un único átomo inicial, los vecinos una vez quitados se consideran secuencialmente, hasta que se encuentre un único átomo inicial o se muestre que él no existe.
- (d) Si los criterios previos no alcanzan a definir un único átomo de inicio, el mismo se determina considerando los números de coordinación de aquellos átomos del anillo que tienen la mayor prioridad en la Tabla II-1. El átomo de inicio es aquel con el mayor número de coordinación. Si es necesario, los números de coordinación de los átomos vecinos se consideran secuencialmente, hasta que se encuentre un único átomo de comienzo o se muestre que no existe.

Nota 5c : *Nomenclature of Organic Chemistry*, Pergamon Press, Oxford, 1979 (ver también *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, (1994).

- (e) Si la aplicación de los criterios anteriores identifica dos o más candidatos como átomos de inicio, se debe realizar una elección entre ellos. Se da prioridad al átomo cuyo ligando aparece primero en la lista alfabética.
- (f) Si todos los ligandos son iguales, los ligandos en los vecinos una vez removidos se consideran secuencialmente, hasta que se encuentre un único átomo de inicio. Si este no se encuentra por este método, la simetría del anillo y sus ligandos es tal que una elección arbitraria conducirá a un nombre único. El átomo de inicio puede ser escogido en forma arbitraria en caso de varios candidatos con igual prioridad.

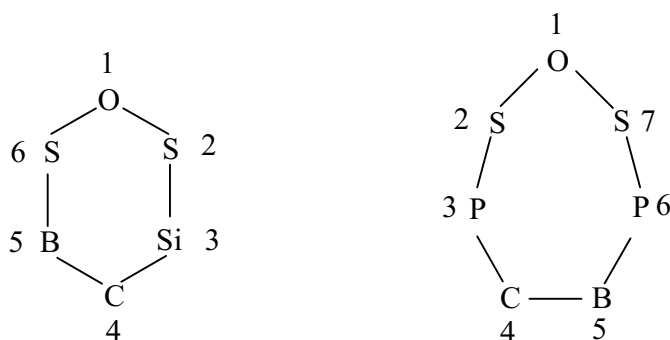
II-5.2.2.1.2 Dirección de la numeración.

Ella está determinada por la aplicación ordenada de los siguientes criterios hasta que se alcanza una decisión:

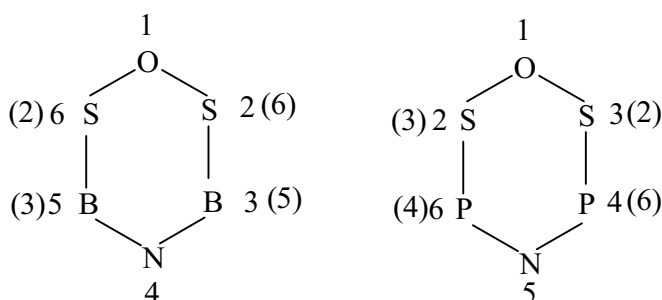
- (a) La dirección de la numeración se dirige desde la posición 1 hacia cualquier átomo vecino que se liste primero en la Tabla II-1.
- (b) Si ambos átomos vecinos son iguales, se compara el par de los próximos vecinos, hasta que se identifica un único átomo en la Tabla II-1.

Ejemplos:

1. Numeración única.



2. Numeración alternativa, como se muestra entre paréntesis

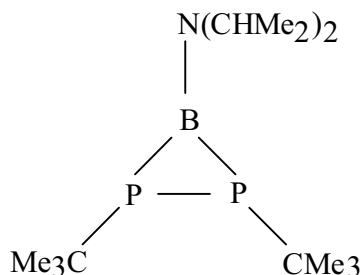


- (c) Cuando no se puede determinar la dirección de la numeración por consideración de los átomos anulares, ello se determina considerando a los ligandos. La dirección de numeración va desde el átomo de inicio hacia el vecino con un ligando.

- (d) Si ambos tienen ligandos la dirección es hacia el átomo cuyo ligando viene primero en la lista alfabética.
- (e) Si los ligandos son iguales, se consideran a los vecinos más próximos y así siguiendo hasta arribar a una única dirección. Si no se encuentra ninguna, la simetría del anillo y de los ligandos conduce a un único nombre independientemente de la dirección.

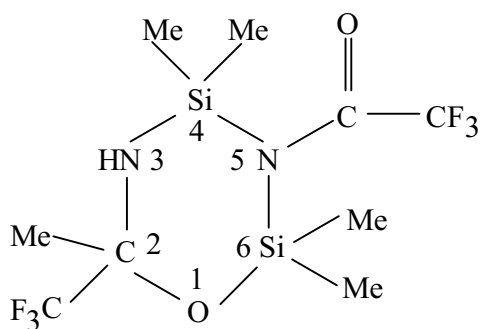
Ejemplos:

1.



1,2-di-*tert*-butil-3-diisopropilamino-3-bori-1,2-difosfi-[3]ciclo

2.

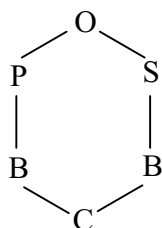


3-hidrido-2,4,4,6,6-pentametil-5-trifluoroacetil-2-trifluorometil-3,5-diazi-2-carbi-1-oxi-4,6-disili-[6]ciclo

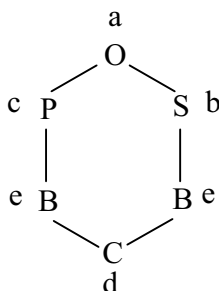
II-5.2.2.1.3 Procedimiento de numeración.

A los fines de facilitar la numeración, los miembros de los anillos de un dado sistema se pueden etiquetar alfabéticamente con lo cual se indica la posición relativa en la secuencia de la Tabla II-1.

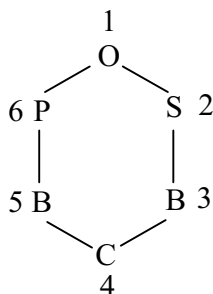
En el anillo



las posiciones relativas en la secuencia de elementos son como sigue (ver Sección II-5.2.2.1.2):

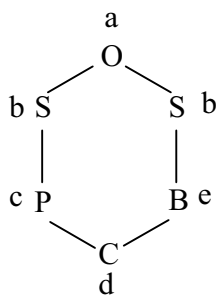


Para la numeración, se elige aquella dirección que da la secuencia inicial por las primeras letras en el alfabeto. La secuencia resultante a, b, e, d, e, c conduce a la siguiente numeración



Si el átomo inicial en el anillo posee vecinos de la misma clase sobre ambos lados, se prefiere la secuencia que contiene la segunda o subsecuente secuencia de las primeras letras en el alfabeto.

Entonces en

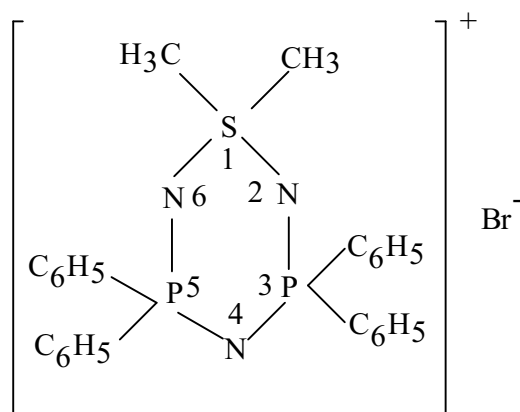


la secuencia es a, b, c, d, e, b y no a, b, e, d, c, b.

II-5.2.2.2 Compuestos anulares monocíclicos catiónicos

Los cationes inorgánicos cíclicos se nombran en la misma forma que los sistemas anulares neutros, pero en vez del sufijo ciclo se usa el sufijo ciclo. Se puede insertar antes de la terminación -io un localizante de carga.

Ejemplos:



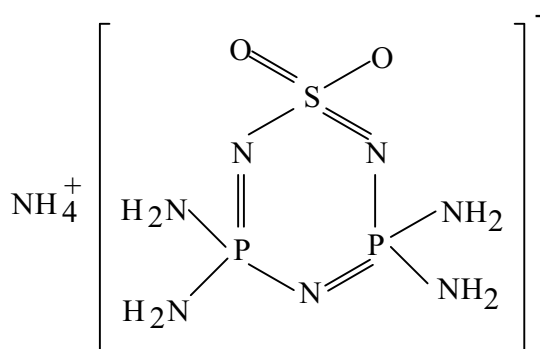
bromuro de 1,1-dimetil-3,3,5,5-tetrafenil-2,4,6-triazi-3,5-difosfi-1-sulfil-[6]ciclo

II-5.2.2.3 Compuestos anulares monocíclicos aniónicos

Los compuestos cíclicos inorgánicos aniónicos se nombran de la misma manera que los anillos neutros, pero en vez del sufijo *ciclo* se emplea el sufijo *ciclato*. Se puede insertar un localizante para la carga antes de la terminación *-ato*.

Ejemplos:

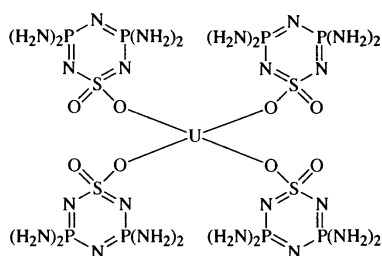
1.



amonio 3,3,5,5-tetraamido-1,1-dioxo-2,4,6-triazi-3,5-difosfil-1-sulfil-[6]ciclato

Cuando un anillo monocíclico aniónico actúa como un ligando, su nombre se modifica reemplazando la terminación *-ate* por *-ato*.

2.



tetrakis(3,3,5,5-tetraamido-1,1-dioxo-2,4,6-triazi-3,5-difosfil-1-sulfil-[6]ciclato)uranio(IV)

II-5.3 CADENAS RAMIFICADAS Y COMPUESTOS POLICÍCLICOS

II-5.3.1 Introducción

El método descrito previamente se puede extender convenientemente a compuestos en cadena que contienen estructuras ramificadas más complicadas, a compuestos policíclicos y a compuestos mixtos cadena-anillo, por uso del descriptor nodal general (Nota 5d).

La nomenclatura nodal fue desarrollada originalmente para resolver problemas encontrados al nombrar moléculas orgánicas complicadas. Está basado en la descripción de la estructura de una molécula en términos de su grafo. Cada grafo se considera como compuesto por uno o más módulos que se definen como entidades separadas durante la numeración y la denominación del conjunto de grafos. A su vez, cada módulo está compuesto por nodos que son las unidades más sencillas en el grafo y representan un átomo o un grupo de átomos (nodos de contracción).

La nomenclatura nodal general define reglas por las cuales los nodos del grafo se ordenan y numeran. Ella difiere de la nomenclatura orgánica estándar porque se debe suministrar un localizante numérico único para cada nodo en el grafo. Al nivel más general del tratamiento la nomenclatura nodal no especifica la naturaleza de los nodos o el enlace entre ellos. Así, no es necesario suponer ningún número de coordinación específico para ningún nodo. Entonces, los principios nodales bien se pueden aplicar para la nomenclatura sustitutiva usada en química orgánica (Nota 5e) y para la nomenclatura ordinaria de coordinación en química inorgánica (Nota 5a). La nomenclatura nodal también es útil para computarizar la nomenclatura química (Nota 5f).

En lo que sigue, se resumen los fundamentos básicos para construir el descriptor nodal de acuerdo a los conceptos desarrollados por Lozac'h, Goodson y Powell (Nota 5d) seguido por su aplicación especial a las cadenas ramificadas y los sistemas inorgánicos policíclicos.

II-5.3.2 El descriptor nodal

II-5.3.2.1 Definiciones básicas

Los módulos del grafo (o el grafo mismo si sólo hay un módulo en la estructura) pueden ser acíclicos, monocíclicos o policíclicos.

- Un *grafo acíclico* (módulo) es una cadena no ramificada de nodos, o dos o más cadenas no ramificadas de nodos conectados entre sí sin formación de una estructura cíclica.
- Un *grafo monocíclico* (módulo) se construye cuando la terminación de la cadena de nodos se conecta al otro extremo formando un solo anillo en la estructura.
- Un *grafo policíclico* (módulo) consiste un anillo monocíclico de nodos y uno o más puentes que son enlaces de valencia o cadenas de nodos conectando los nodos del anillo y/u otros puentes en el sistema policíclico.
- Si una estructura de grafo está compuesta por más de un módulo cíclico o al menos un módulo acíclico y otro cíclico, ella se denomina un *cuerpo*.

Nota 5d : N. Lozac'h, A. L. Goodson, and W. H. Powell, *Angew. Chem.*, **91**, 951 (1979); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **18**, 887 (1979).

Nota 5e : N. Lozac'h and A. L. Goodson, *Angew. Chem.*, **96**, 13 (1984); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **23**, 33 (1984); D. J. Polton, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **32**, 430 (1992).

Nota 5f : D. J. Polton, *Chemical Nomenclature and the Computer*, Research Studies Press, 1993.

II-5.3.2.2 La numeración de los nodos

II-5.3.2.2.1 Consideraciones generales.

Cada nodo en el grafo necesita ser numerado. La nomenclatura nodal general (Nota 5d) suministra instrucciones detalladas acerca de la prioridad relativa de los nodos independientemente de su identidad química. La naturaleza química de los nodos se toma en consideración sólo para distinguir entre dos con numeraciones equivalentes. Ésta también es una razón básica para ser seguida en la denominación de compuestos anulares inorgánicos y cadenas más complicadas. La prioridad se decide, siempre que sea posible, empleando reglas básicas de nomenclatura nodal general. Las reglas de prioridad derivadas para las cadenas simples y los compuestos monocíclicos (ver Sección II-5.2) que tienen en cuenta la naturaleza química de los elementos de acuerdo a la secuencia de prevalencia de elementos de la Tabla II-1 sólo se toma en consideración cuando surgen ambigüedades.

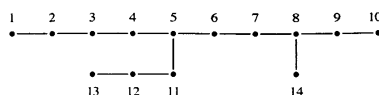
II-5.3.2.2.2 Grafos acíclicos.

El grafo acíclico está caracterizado por una cadena principal que es definida por el mayor número de nodos en una cadena no ramificada. Los átomos terminales de hidrógeno no son considerados como parte de la cadena. Ellos siempre se nombran como ligandos. Si el penúltimo átomo está ligado a más de un átomo diferente al hidrógeno, el átomo terminal se elige como el primero que se encuentra en la secuencia de precedencia de los elementos (ver Tabla II-1). Todas las otras cadenas en el grafo acíclico se definen como ramas.

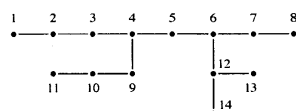
Si hay más de una cadena no ramificada de la mayor longitud, la cadena principal es aquélla que tenga la mayor rama unida a ella. Los nodos en la cadena principal se numeran de un extremo a otro de manera tal que el localizante más bajo se da a esta rama de mayor prioridad (Nota 5g). Las ramas se numeran en el orden de su prioridad (longitud decreciente) comenzando desde el nodo unido a la parte del grafo ya numerado.

Ejemplos:

1.

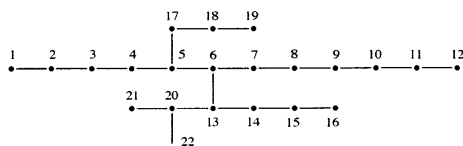


2.



En este caso hay dos cadenas principales (1-2-3-4-5-6-7-8 y 11-10-9-4-5-6-7-8). La elección debe ser hecha considerando la secuencia de prioridad de elemento.

3.



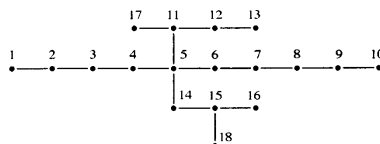
Si quedan numeraciones alternativas, la elección se hace comparando los localizantes de las ramas término a término, en el orden que las ramas son numeradas, y seleccionando los

Nota 5g : Nótese que esta práctica es distinta en la nomenclatura de cadenas (Sección II.2.2) donde sólo la cadena principal está incluida en la estructura básica y las ramas se nombran como ligandos. Entonces, la secuencia de prioridad de elementos (Tabla II-1) gobierna la elección de la cadena principal.

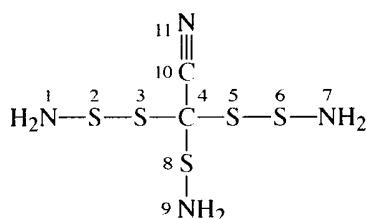
localizantes más bajos posibles. Aún si quedara alguna ambigüedad, ella se resuelve considerando la secuencia de prioridad.

Ejemplos:

4.



5.



La cadena principal tiene 7 átomos de longitud y ellos están numerados comenzando a partir de alguno de los nitrógenos de los grupos NH_2 . Como los átomos de hidrógeno terminales no son considerados como parte de la estructura nodal, las dos ramas conectadas con la cadena principal son de igual longitud. Sin embargo, el S tiene prioridad sobre el C en la secuencia de precedencia de los elementos y así la rama que contiene al S se numera primero.

II-5.3.2.2.3 Grafos monocíclicos.

El punto de arranque y la dirección de la numeración de átomos en el compuesto monocíclico se determina considerando la naturaleza química de los átomos constituyentes del anillo o de los ligandos unidos al anillo de acuerdo a la secuencia de prioridad (Tabla II-1).

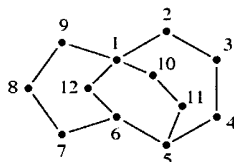
II-5.3.2.2.4 Grafos policíclicos.

Un grafo policíclico está caracterizado por un anillo principal. Cadenas ligadas en ambos extremos del anillo central se llaman puentes. El anillo principal en un grafo policíclico se define como un anillo monocíclico con el mayor número de nodos. El puente principal se define como la cadena más larga de nodos cuyos extremos están unidos al anillo principal. Todos los otros puentes se denominan puentes secundarios. Nótese que un puente también puede ser un enlace en cuyo caso el mismo no contiene nodos.

La numeración del anillo en un grafo policíclico principal comienza en una de las cabeceras de puente (el nodo donde el puente principal está ligado al anillo principal) y procede en la dirección para dar el menor localizante posible para la otra cabecera. Los puentes se numeran secuencialmente luego del anillo principal en el orden de su prioridad, comenzando siempre con el puente más largo conectado a los nodos del grafo previamente numerado. En caso de que existieran dos o más puentes de igual longitud, aquel con el localizante menor tiene la mayor prioridad. La numeración de cada puente comienza con el nodo conectado al nodo con el localizante menor.

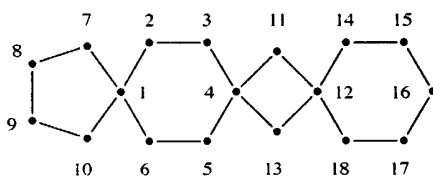
Ejemplos:

1.



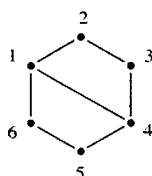
El anillo principal posee nueve nodos. El puente principal es la cadena de dos nodos conectando los nodos 1 y 5.

2.



En caso de que hubiera dos o más anillos monocíclicos teniendo el mayor número de nodos, el anillo principal se selecciona como aquel que tiene un puente principal con el mayor número de nodos.

3.



Los átomos 1 y 4 están conectados por un enlace y así el puente principal no contiene nodos.

II-5.3.2.2.5 Cuerpos.

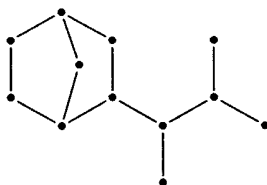
La numeración defina de los cuerpos se realiza numerando inicialmente cada módulo como si fuera un grafo aislado. El módulo principal y la prioridad de los módulos en cuerpos se determinan de acuerdo a la aplicación sucesiva de los siguientes criterios: (a) mayor número de nodos; (b) el módulo cíclico se prefiere al acíclico; (c) mayor número de anillos o ramas; (d) el descriptor con el numeral arábigo preferido en la primera diferencia: si la primera diferencia corresponde a la longitud de una cadena o un puente, el numeral preferido es el más alto; si la primera diferencia aparece en el localizante (superíndice), el numeral preferido es el más bajo.

La numeración original se retiene para el módulo principal. La numeración de los nodos en todos los otros módulos se modifica secuencialmente, comenzando con un módulo adyacente al módulo principal (Nota 5d). La numeración se realiza adicionando a

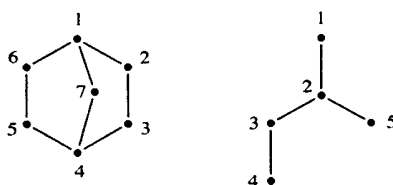
cada localizante original un número igual al número total de nodos en otros módulos a los cuales ya han sido asignados localizantes definitivos.

Ejemplo:

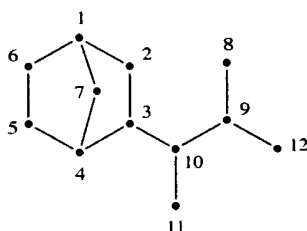
1.



La molécula consiste de un módulo cíclico y otro acíclico los cuales se numeran inicialmente como sigue



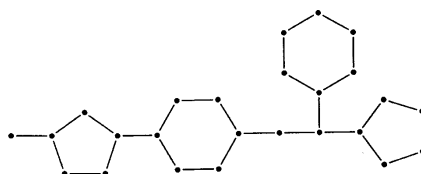
El módulo cíclico tiene preferencia por sobre el acíclico y por lo tanto es el módulo principal en el grafo. La numeración en el módulo acíclico se modifica agregando 7 a cada localizante. La numeración final definitiva es entonces la siguiente:



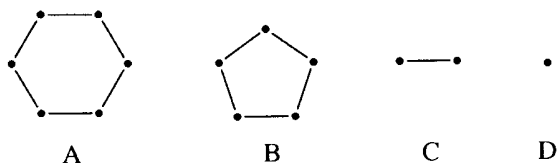
En algunos casos hay varios esquemas de numeración posibles para un cuerpo dado. La elección correcta se hace en base a la prioridad del grafo del módulo (Nota 5d). En el caso de cualquier ambigüedad remanente, la numeración correcta posee el localizante más bajo definiendo las ligaduras de los módulos. Si hace falta, la resolución final se realiza considerando la secuencia de prioridad de elementos.

Ejemplo:

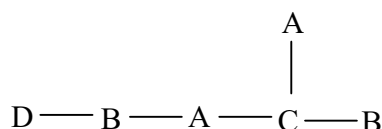
2.



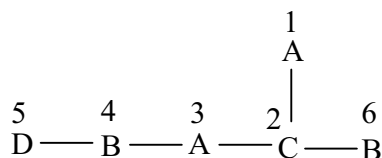
El grafo consiste de los siguientes módulos:



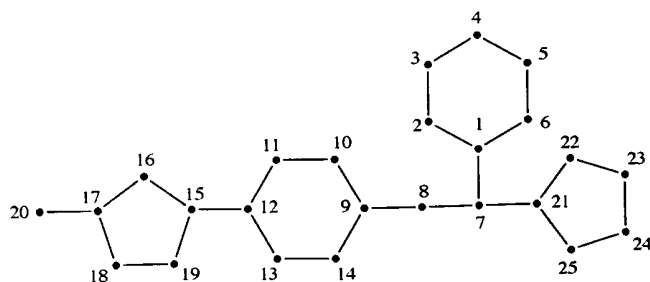
A ellos se les asigna los descriptores de prioridad A-D en el orden de prioridad decreciente. En efecto, las letras A-D representan nodos de contracción. Así, el grafo prioritario del módulo de la molécula se puede escribir como sigue:



Ahora los módulos se numeran de acuerdo a los números de prioridad de módulos. Ellos empiezan con el módulo principal y se sigue a través de la cadena de módulos en orden de prioridad decreciente. Las reglas de asignación de precedencia de módulos son similares, pero no análogas, a la numeración de los nodos de los gráficos acíclicos (Nota 5d):



La numeración definitiva de los nodos en el cuerpo total se realiza en el orden de prioridad de los módulos (para mayores detalles acerca de la numeración definitiva de los cuerpos, ver Nota 5d).



II-5.3.2.3 Descriptor

La descripción unívoca del grafo se suministra por un descriptor. Ello es una porción numérica en el nombre y se coloca entre corchetes cuadrados.

II-5.3.2.3.1 Grafos acíclicos.

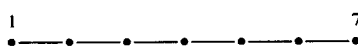
El descriptor de los grafos acíclicos se construye como sigue:

- (a) El descriptor de los grafos acíclicos comienza con un numeral arábigo que indica el número de nodos en la cadena principal (Nota 5h). Esta porción del descriptor finaliza con un punto.
- (b) El punto final es seguido por numerales arábigos positivos indicando el número de nodos en cada rama citada en el orden de su prioridad.
- (c) Un subíndice localizante para cada rama denota el nodo en la parte del grafo ya numerado al cual se une la rama.

Cuando es posible escribir descriptores alternativos para el grafo el correcto es el que tiene el subíndice más bajo en el primer punto de diferencia en la comparación término a término.

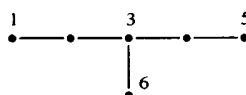
Ejemplos:

1.



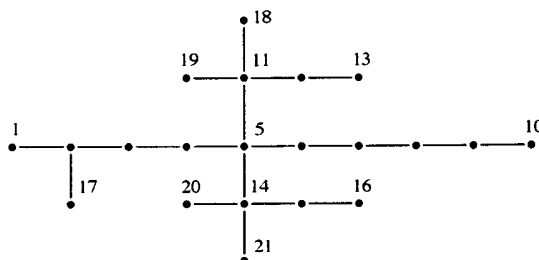
descriptor: [7]

2.



descriptor: [5.1³]

3.

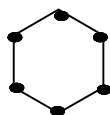


descriptor: [10.3⁵3⁵1²1¹¹1¹¹1¹⁴1¹⁴]

II-5.3.2.3.2 Grafos cíclicos.

El descriptor de los grafos monocíclicos es un numeral arábigo indicando el número de nodos en el anillo. El numeral es precedido por cero que indica la presencia del anillo (Nota 5i).

Ejemplo:



descriptor: [06]

Nota 5h : Si el entramado nodal consiste sólo de la cadena principal con todas las ramas denominadas como ligandos, el descriptor nodal es idéntico con el indicador \bar{n} usado para los compuestos de cadenas inorgánicas simples.

Nota 5i : En la nomenclatura para compuestos monocíclicos (Ver Sección II.5.2.3) el cero no es una parte requerible del descriptor; sin embargo, se permite su uso si la naturaleza cíclica del compuesto necesita ser enfatizada.

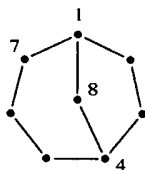
El descriptor para los grafos cíclicos se construye de manera análogo a aquel dado para los grafos ramificados.

- El descriptor comienza con un cero que indica la presencia del anillo seguido por un numeral arábigo denotando el número de nodos en el anillo principal. Esta porción del descriptor finaliza con un punto.
- El punto final es seguido por numerales arábigos que indican el número de nodos en cada puente citado en el orden de prioridad.
- Un par de superíndices localizantes para cada puente numeral, separado por una coma y citado en orden numérico creciente, denota los nodos en la parte del grafo ya numerado al cual cada puente está unido.

Si hubiera espacio para una elección del anillo principal, puente principal, punto de inicio y/o dirección de numeración en el grafo policíclico, los números arábigos que denotan las longitudes y las posiciones de los puentes en la diversas alternativas se comparan término a término en el orden en que aparecen. El descriptor con el numeral arábigo en la primera diferencia se elige (en el caso de longitud de puente, el numeral preferido es el más alto; en caso del localizante, es el más bajo).

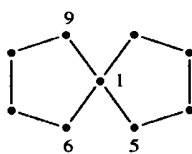
Ejemplos:

2.



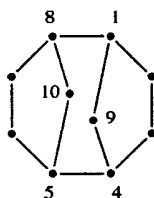
descriptor: [07.1^{1,4}]

3.



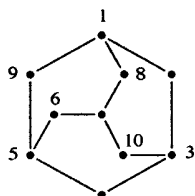
descriptor: [05.4^{1,1}]

4.

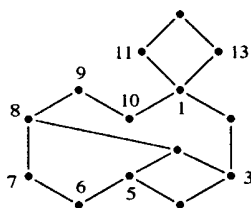


descriptor: [08.1^{1,4}1^{5,8}]

5.

descriptor: $[08.1^{1,5}1^{3,7}]$

6.

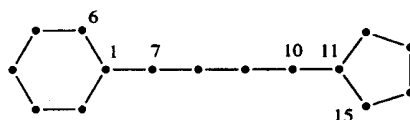
descriptor: $[010.3^{1,1}1^{3,5}0^{4,8}]$

II-5.3.2.3.3 Cuerpos

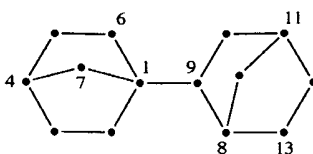
El descriptor del cuerpo consiste de corchetes cuadrados encerrando, en el orden de prioridad, los descriptores nodales de cada módulo en paréntesis y citados como si ellos fueran grafos aislados. Entre los descriptores de los módulos se indican los localizantes de los nodos unidos a los módulos. Estos localizantes se separan por una coma y se referencian por su numeración secuencial definitiva cuando se considera el cuerpo completo.

Ejemplos:

1.

descriptor: $[(06)1:7(4)10:11(05)]$

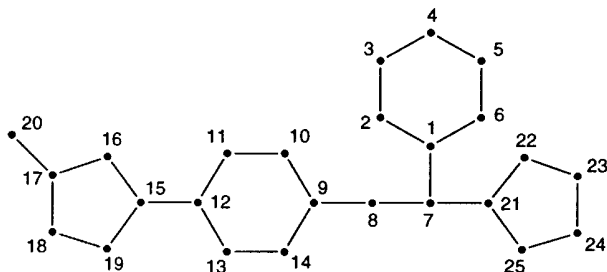
2.

descriptor: $[(06.1^{1,4})1:9(06.1^{8,11})]$

Los descriptores para ambos módulos se obtienen como si el módulo fuera un grafo aislado. El nodo más alto en el módulo principal tiene el localizante 7. El localizante más bajo (ocho) del segundo módulo está ubicado en la cabecera del puente tal como es requerido por las reglas de numeración y no está en el nodo donde los módulos están unidos

entre sí. Así es posible inferir del descriptor que las dos partes de la moléculas son idénticas, pero unidas una a otra en localizaciones respectivas distintas.

3.



descriptor: [(06)1:7(2):8:9(06)12:15(05)17:20(1)7:21(95)]

II-5.3.3 Construcción del nombre

II-5.3.3.1 Consideraciones generales

Cuando se nombra un compuesto es importante decidir que partes de la molécula deberían incluirse en el esqueleto nodal. Todas las otras partes se nombrarán como ligandos.

Si el esqueleto nodal consiste solamente de la cadena o el anillo principal, los compuestos se nombran siguiendo la nomenclatura derivada para las cadenas sencillas y los compuestos monocíclicos (ver Sección II-5.2).

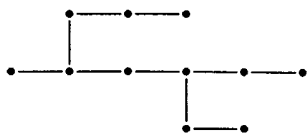
Si el esqueleto nodal está compuesto de una estructura acíclica ramificada, el compuesto se llama catena precedido de un prefijo multiplicativo tal como di-, tri-, etc. para indicar el número de ramas en la molécula. Las especies catiónicas se llaman cetenio y las especies aniónicas catenato.

De manera análoga un compuesto policíclico neutro se denomina ciclo precedido de un prefijo multiplicativo di-, tri-, etc. para indicar el número de anillos en la molécula. Las especies catiónicas se llaman ciclo y las especies aniónicas ciclato.

Si hay tanto módulos cíclicos como acíclicos en la molécula, el compuesto se llama catenaciclo (los nombres se citan en orden alfabético) con ambas partes del nombre precedido por un prefijo multiplicativo apropiado.

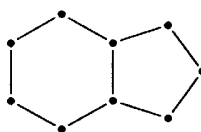
Ejemplos:

1.



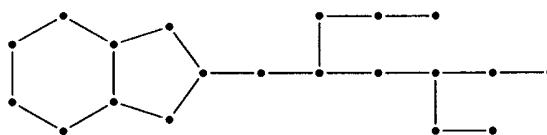
tricatena

2.



diciclo

3.



tricateno ciclo

Como el descriptor nodal sólo indica el arreglo geométrico de los átomos, es necesario establecer unívocamente la identidad química de cada nodo. Siguiendo la práctica introducida para las cadenas inorgánicas y los compuestos monocíclicos, se nombran a los átomos esqueléticos formando la estructura nodal modificando los nombres de los grupos sustituyentes dados en la Tabla II-5.1. Todos los átomos o grupos de átomos que no son considerados como parte de la estructura policíclica se nombran como ligandos.

II-5.3.3.2 Ligandos

En principio, todos los átomos en la molécula se pueden tratar como parte de la estructura nodal. Sin embargo, los nombres resultantes serán bastante engorrosos como para ser de uso práctico. Entonces es preferible nombrar algunos átomos o grupos de átomos como ligandos unidos al esqueleto nodal.

Hay átomos o grupos de átomos que usualmente son considerados como ligandos en los compuestos de coordinación. Algunos ejemplos de ligandos típicos se dan en la Tabla II-5.2. Para un tratamiento más detallado, ver Capítulo I-10 de la Nota 5b. También es permisible nombrar alguna parte de la molécula como un ligando si se considera conveniente en situaciones específicas. Sin embargo, hay dos restricciones en el uso de los ligandos en la estructura nodal:

- (a) Todos los ligandos deben ser monodentados.
- (b) La cadena principal en los módulos acíclicos sólo pueden ser determinados por un ligando si éste es un átomo de hidrógeno o un fragmento orgánico.

<i>Ligando</i>	<i>Nombre</i>	<i>Ligando</i>	<i>Nombre</i>
F ⁻	fluoro	CH ₃	metil
Cl ⁻	cloro	CH ₃ CH ₂	etil
Br ⁻	bromo	CH ₃ CH ₂ CH ₂	propil
I ⁻	yodo	(CH ₃) ₃ C	1 1-dimetiletil
CO	carbonil	C ₅ H ₅	ciclopentadienil
NCO ⁻	cianato	C ₆ H ₅	fenil
Ph ₃ P	trifenilfosfano		

Tabla II.5.2 Ejemplos de ligandos típicos (Nota 5j)

II-5.3.3.3 La construcción del nombre

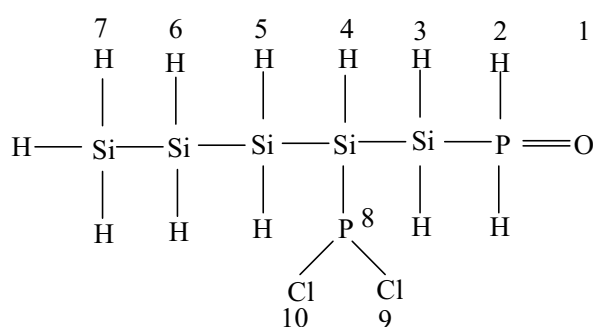
El nombre consiste de las siguientes partes:

Nota 5j : Ver Tablas I-1°.1, I-10.2, I-10.3, I-1°.4 y la Sección I-10.9 de la Nota 5b para ejemplos adicionales.

- (a) Ligandos listados en orden alfabético completo con sus localizante secuenciales definitivos.
- (b) Átomos esqueléticos formando la estructura nodal listados en orden alfabético junto con sus localizantes secuenciales definitivos cuando es necesario.
- (c) El descriptor nodal entre corchetes cuadrados.
- (d) El designador catena, ciclo o catenaciclo para moléculas neutras, catenio, ciclo o catenaciclco para cationes y catenato, ciclato o catenaciclato para aniones, precedido por prefijos multiplicativos apropiados.

II-5.3.3.3.1 Compuestos acíclicos ramificados

Ejemplos:

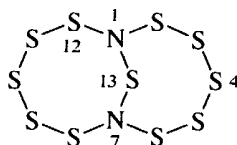


2,2,3,3,4,5,5,6,6,7,7,7-dodecahidrido-9,10-dicloro-1-oxi-2,8-difosfi-3,4,6,7-pentasil-[7.2⁴]dicatena

Sería preferible enfatizar en el nombre que dos átomos de cloro unidos al P(8) son idénticos. Entonces el nombre debería ser: 8,8-dicloro-2,2,3,3,4,5,5,6,6,7,7,7-dodecahidro-1-oxi-2,8-difosfi-3,4,6,7-pentasil-[7.1⁴]dicatena.

II-5.3.3.3.2 Compuestos policíclicos

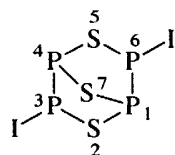
Ejemplos:



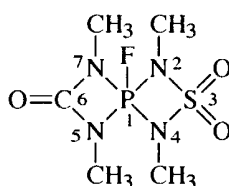
1,7-diazi-2,3,4,5,6,8,9,10,11,12,13-undecasulfi-[012.1^{1,7}]díciclo, ó
1,7-diaziundecasulfi-[012.1^{1,7}]díciclo

Como el compuesto sólo contiene nitrógeno y azufre, no es necesario indicar los localizantes de todos los átomos de azufre. Sólo son necesarios los localizantes de los dos átomos de nitrógeno.

2.

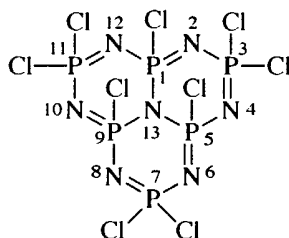
3,6-diiodo-1,3,4,6-tetrafosfi-2,5,7-trisulfi-[06.1^{1,4}]díciclo

3.

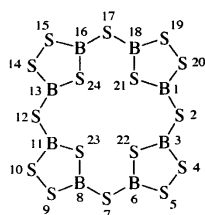
1-fluoro-2,4,5,7-tetrametil-3,3,6-trioxo-2,4,5,7-tetraazi-6-carbi-1-fosfi-3-sulfi-[04.3^{1,1}]díciclo.

El fósforo posee localizante 1. Como la estructura nodal comprende solamente siete átomos formando dos anillos con otros grupos nombrados como ligandos, no es posible seleccionar al anillo principal sin ambigüedades considerando sólo el grafo de la molécula. La selección del anillo principal se determina por el hecho de que el azufre es prioritario respecto del carbono de acuerdo a la secuencia de prioridades de los elementos (ver Tabla II-1).

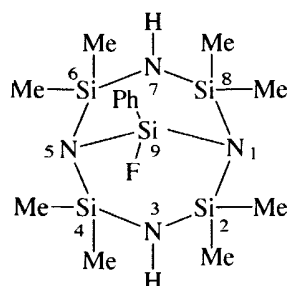
4.

1,3,3,5,7,7,9,11,11-nonacloro-2,4,6,8,10,12,13-heptaazi-1,3,5,7,9,11-exafosfi-[012.1^{1,5}0^{9,13}]tríciclo

5.

1,3,6,8,1,13,16,18-octaboriexadecasulfi-[020.1^{1,18}1^{3,6}1^{8,11}1^{13,16}]pentáciclo

6.

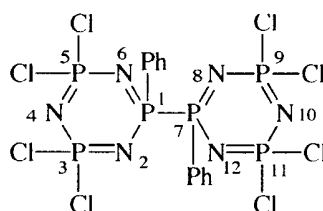


9-fluoro-3,7-dihidro-2,2,4,4,6,6,8,8-octametil-9-fenil-1,3,5,7-tetraazi-2,4,6,8,9-pentasil-
-[08.1^{1,5}]diciclo

II-5.3.3.3 Cuerpos

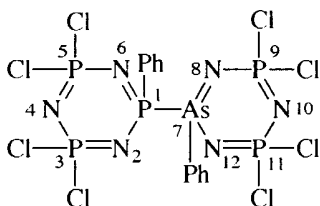
Ejemplos:

1.



3,3,5,5,9,9,11,11-octacloro-1,7-difenil-2,4,6,8,10,12-exaazy-1,3,5,7,9,11-exafosfi-
-[(06)1:7(06)]diciclo

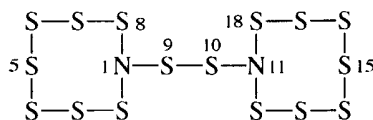
Las dos moléculas son idénticas y en consecuencia pueden actuar como un módulo principal. Sin embargo, consideremos un caso donde el P(7) se sustituye por As:



3,3,5,5,9,9,11,11-octacloro-1,7-difenil-7-arsi-2,4,6,8,10,12-exaazy-1,3,5,9,11-pentafosfi-
-[(06)1;7(06)] diciclo.

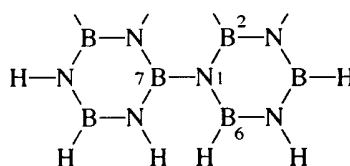
De acuerdo a la nomenclatura nodal general (Nota 5d), cualquier anillo puede constituir el módulo principal, pero el fósforo tiene prioridad sobre el arsénico de acuerdo a la Tabla II-1, y ello determina la numeración.

2.



1,11-diaziexadecasulfi-[(08)1:9(2)10:11(08)]catenadidiciclo

3.



2,3,4,5,6,8,9,10,11,12-decahidro-1,3,5,8,10,12-exaazi-2,4,6,7,9,11-exabori-[(06)1:7(06)]diciclo

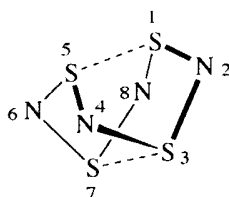
Los dos módulos difieren sólo en sus punto de unión. El módulo principal se determina de acuerdo a la mayor prioridad del nitrógeno respecto del boro en la secuencia de prioridad de elementos.

II-5.3.3.3.4 Compuestos tipo jaula

El descriptor nodal establece una conectividad, pero no la geometría de la molécula. La mayoría de los compuestos policíclicos inorgánicos forman estructuras de jaula (o caja). Si la jaula es relativamente abierta y de baja simetría, es aconsejable usar el presente método que involucra el uso de descriptores nodales.

Ejemplo:

1.



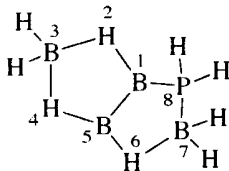
Esta molécula a menudo se considera como un compuesto monocíclico simple. Entonces se puede nombrar como 2,4,6,8-tetraazi-1,3,5,7-tetrasulfi-[8]ciclo o 2,4,6,8-tetraazi-1,3,5,7-tetrasulfi[08]ciclo.

Sin embargo, hay una interacción significativa entre los átomos de azufre y en consecuencia en algunos casos puede ser preferible nombrar al compuesto como una jaula en vez de un monociclo simple: 2,4,6,8-tetraazi-1,3,5,7-tetrasulfi-[08.0^{1,5}0^{3,7}]tríciclo.

Las jaulas de borano de baja simetría constituyen un área particularmente útil de aplicación para la nomenclatura del descriptor nodal incorporada con el anillo y la cadena.

Ejemplos:

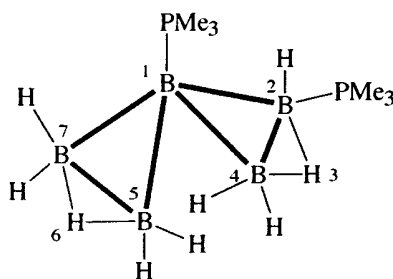
2.



3,3,7,7,8,8-exahidro-1,3,5,7-tetrabori-2,4,6-trihidroni-8-fosfi-[08.0^{1,5}]diciclo

El hidrógeno tiene precedencia respecto del fósforo de modo que determina la dirección de la numeración del anillo principal. Mientras que los átomos de hidrógeno que puentean podrían ser nombrados como ligantes puentes, ellos pueden ser convenientemente incorporados en la estructura nodal.

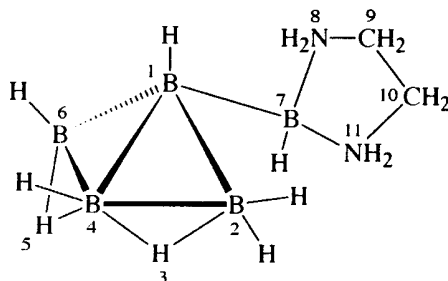
3.



2,4,4,5,5,7,7-heptahidrido-1,2-bis(trimetilfosfano)-1,2,4,5,7-pentabori-3,6-dihidroni-[04.3^{1,1}0^{2,4}0^{5,7}]tetraciclo.

La estructura nodal consiste de dos anillos equivalentes de cuatro nodos. El anillo principal se selecciona mediante la consideración de los ligandos (PMe₃ es prioritario respecto del H).

4.

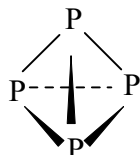


1,2,2,4,6,7,8,8,9,9,10,10,11,11-tetradecahidro-8,11-diazi-1,2,4,6,7-pentabori-9,10-dicarbi-3,5-dihidroni-[(06.0^{1,4}0^{2,4}0^{4,6})1:7(05)]pentaciclo

Si la estructura de jaula posee alta simetría, la descripción de la estructura por el descriptor nodal es más problemática, mientras que es posible dar un nombre único a tal molécula, la visualización del compuesto como una jaula simétrica poliédrica no es sencilla.

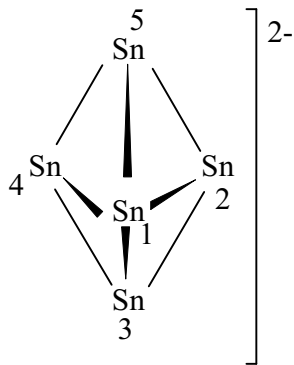
Ejemplos:

5.



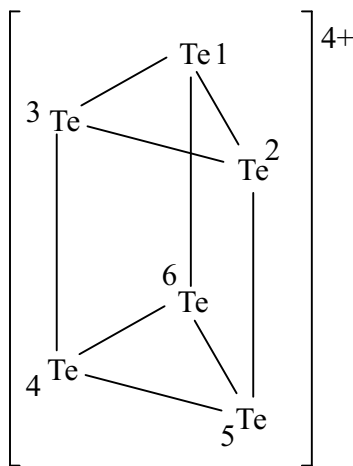
tetrafosfi-[04.0^{1,3}0^{2,4}]tricyclo

6.



pentaestani-[05.0^{1,3}0^{1,4}0^{2,4}0^{2,5}]pentaciclato(2-)

7.



exateluri-[06.0^{1,3}0^{2,5}0^{4,6}]tetraciclo(4+)

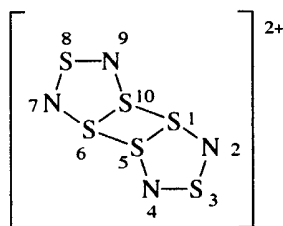
En general, si la estructura posee un poliedro de n caras, el compuesto será nombrado como una entidad policíclica consistente de $n-1$ anillos. En muchos casos, sin embargo, las jaulas de alta simetría se nombran mejor como racimos.

II-5.3.3.3.5 Especies iónicas y ligandos.

Los nombres para los iones pueden ser convenientemente derivadas de las correspondientes moléculas neutras modificando los nombres catena y ciclo. El número de carga de las especies se indican entre paréntesis al final del nombre.

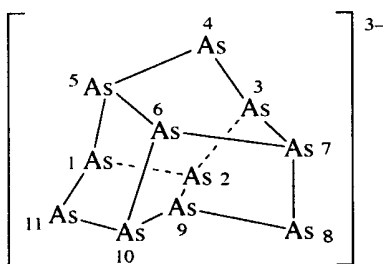
Ejemplos:

1.



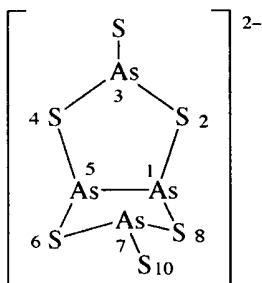
2,4,7,9-tetraazi-1,3,5,6,8,10-exasulfi-[010.0^{1,5}0^{6,10}]tricitlio(2+)

2.



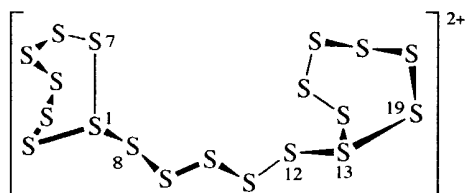
undecaarsi-[011.0^{1,5}0^{2,9}0^{3,7}0^{6,10}]pentaciclato(3-)

3.



3,7-disulfido-1,3,5,7-tetraarsi-2,4,6,8-tetrasulfi-[08.0^{1,5}]dicitlato(2-)

4.



nonadecasulfi-[(07)1:8(5)12:13(07)]catenadiciclo(2+)

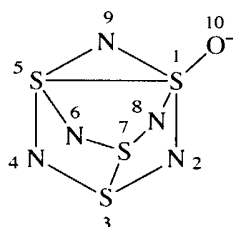
Cuando se desee, la localización de la carga se puede expresar por su localizante nodalantes de la terminación *-io* o *-ate*. Las cargas que no están localizadas en la estructura nodal no se pueden indicar. En consecuencia, si las localizaciones de las cargas son necesarias, todos los átomos pertinentes deben ser incluidos en la estructura nodal.

5.

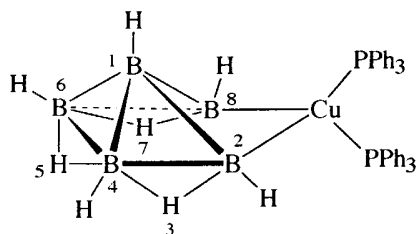
Considérese el ión del ejemplo 3 de esta sección. Para indicar la localización de las cargas el esqueleto nodal se deben incluir dos módulos acíclicos y uno policíclico: 1,3,5,7-tetraarsi-2,4,6,8,9,10-exasulfi-[(08.0^{1,5})3:9(1)7:10(1)]dicatenadicicl-9,10-ato(2-). Nótese que la terminación *-ato* no implica que el módulo cíclico lleva la carga. Las localizaciones de las cargas son dadas sin ambigüedad por los localizantes nodales difinitivas.

La construcción del nombre del ligante sigue los principios introducidos en el Capítulo I-10 de la Nota 5b. Los nombres de los ligandos catiónicos y neutros son idénticos a los nombres de las especies libres, pero los nombres de las especies aniónicas se modifican sustituyendo la terminación *-ate* por la terminación *-ato*. El donador indicado debe ser una parte del esqueleto nodal.

6.

1-oxo-2,4,6,8,9-pentaazi-1,3,5,7-tetrasulfi-[(08.1^{1,5}0^{1,5}0^{3,7})]tetraciclato(1-)

Cuando el átomo donador O(10) se indica, el esqueleto nodal debe consistir de dos módulos: 2,4,6,8,9-pentaazi-10-oxi-1,3,5,7-tetrasulfi-[(08.1^{1,5}0^{1,5}0^{3,7})1:10(1)]catenatetracicl-10-ato 7.

1,2,4,6,8-pentahidro-1,2,4,6,8-pentabori-3,5,7-trihidroni-[(08.0^{1,4}0^{1,6}0^{2,4}0^{4,6}0^{6,8})]exacicl-2,8-atobis(trifenilfosfano)cobre(I)

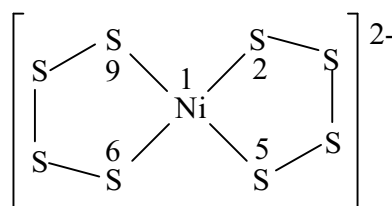
Este compuesto también se puede nombrar como un compuesto de coordinación considerando a la caja de borano como un ligando.

II-5.3.3.3.6 Compuestos de coordinación.

En ciertos casos es preferible nombrar la entidad de coordinación completa como un compuesto policíclico. Esta aproximación es particularmente útil para nombrar a los complejos polinucleares con ligandos puramente quelantes o de puentes.

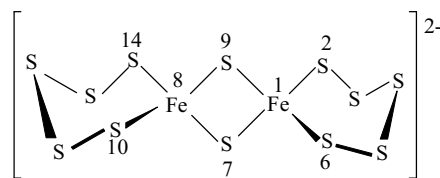
Ejemplos:

1.



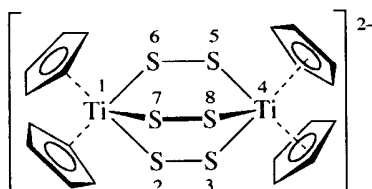
1-niquelooctasulfi-[05.4^{1,1}]dicitrato(2-)

2.



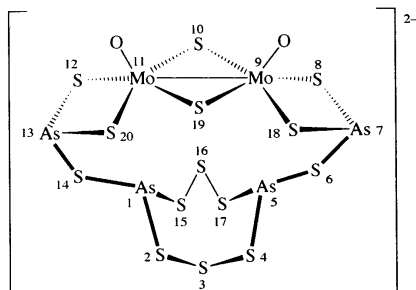
1,8.diferridodecasulfi-[06.3^{1,1}5^{8,8}]tricitrato(2-)

3.



1,1,4,4-tetrakis(ciclopentadienil)-1,4-dititani-2,3,5,6,7,8-exasulfi-[06.2^{1,4}]dicitrato(2-)

4.

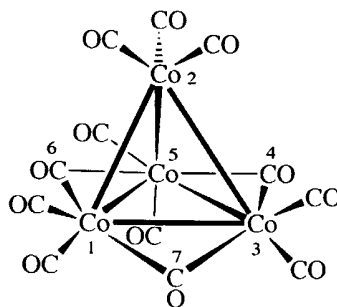


9,11-dioxo-1,5,7,13-tetraarsi-9,11-dimolibdi-tetradecasulfi-[014.3^{1,5}1^{7,9}1^{9,11}1^{11,13}0^{9,11}]exaciclato(2-)

Los compuestos de coordinación polinucleares también pueden ser tratados como compuestos policíclicos. Sin embargo, debe recordarse que como en el caso de los compuestos en jaula no metálicos el descriptor nodal no da indicación alguna de la geometría del racimo; él sólo define la conectividad.

Ejemplo:

5.



1,1,2,2,2,3,3,5,5-nonacarbonil-4,6,7-trioxo-4,6,7-tricarbi-1,2,3,5-tetracobalti-
-[06.1^{1,3}0^{1,3}0^{1,5}0^{2,5}0^{3,5}]exaciclo

II-5.4 CONCLUSIÓN

Este capítulo presenta un nuevo método aditivo para nombrar cadenas inorgánicas y compuestos tipo anillo inorgánico. Aunque el mismo se puede aplicar a cualquier especie molecular, su uso está principalmente orientado a compuestos que están constituidos principal o exclusivamente por átomos distintos al carbono. La aplicación del descriptor nodal permite designar compuestos policíclicos y cadenas ramificadas complicadas así como compuestos consistentes de módulos cíclicos y acíclicos. La selección del esqueleto nodal hace posible comparar estructuralmente especies análogas independientemente de sus identidades químicas.

El método es particularmente apropiado para compuestos tipo anillos y cajas de baja simetría y toda vez que es importante establecer la conectividad entre los átomos. Para cajas y compuestos polinucleares de coordinación de alta simetría es necesario el uso de descriptores estructurales más exactos.

II-6 COMPUESTOS DE INTERCALACIÓN DE GRAFITO

CONTENIDOS

- II-6.1 Consideraciones generales
- II-6.2 Vocabulario
 - II-6.2.1 La reacción
 - II-6.2.2 La lámina intercalada
 - II-6.2.3 Las láminas de carbono
 - II-6.2.4 Jaulas
- II-6.3 Clasificación de los compuestos de intercalación grafiticos
 - II-6.3.1 Compuestos donores y aceptores
 - II-6.3.2 Sales de grafito
 - II-6.3.3 Compuestos binarios, ternarios, cuaternarios, etc.
 - II-6.3.4 Compuestos de multi-intercalación
 - II-6.3.5 Heteroestructuras
- II-6.4 Descripción no basada en la fórmula de compuestos de intercalación grafiticos
- II-6.5 Formulación de compuestos de intercalación grafiticos
- II-6.6 Notación estructural
 - II-6.6.1 Descripción de la secuencia de empaquetamiento
 - II-6.6.2 Descripción del retículo cristalino
 - II-6.6.3 Descripción de la capa epitaxial
 - II-6.6.4 Símbolos para varias distancias

II-6.1 CONSIDERACIONES GENERALES

En los compuestos de intercalación de grafito hay muchas estructuras variadas y complejas. Las siguientes recomendaciones están diseñadas para cubrir la mayoría de los casos (Nota 6a).

Varios tipos de compuestos derivan del grafito. Se pueden distinguir compuestos que tienen especies unidas por enlaces bielectrónicos covalentes a los átomos de carbono, y compuestos en los cuales hay una transferencia de carga hacia o desde láminas grafiticas (ver Sección II-6.3) de la estructura de grafito. Las especies (átomos, iones o moléculas) están, en ambos casos, insertos entre las hojas de carbono. Esto resulta en una expansión más o menos pronunciada que puede ser detectada por difracción de rayos X y que tiene lugar en una dirección perpendicular a las hojas carbonosas.

Necesariamente, las capas de carbono pierden su planaridad en el caso de la unión covalente y se convierte en una estructura de capa plegada. Los enlaces covalentes están formados por reacciones entre grafito y elementos o grupos de alta electronegatividad, como por ejemplo, flúor (que da fluoruros grafitados), oxígeno o grupos hidroxilos (que dan óxido de grafito, también denominados ácidos grafiticos), etc. La ruptura de la

Nota 6a : Ver también A. D. McNaught and A. Wilkinson, *Compendium of Chemical Terminology*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997; Recommended Terminology for the Description of Carbon as a Solid, *Pure Appl. Chem.*, **67**, 473 (1995).

densidad electrónica π generalmente conduce a un decrecimiento drástico de conductividad eléctrica.

En el caso de la interacción de transferencia de carga, las hojas de carbono retienen su estructura planar (aparte de la posible presencia de defectos locales) aún cuando el material huésped se encuentra en los intervalos de intercapas expandidas de la estructura anfitriona. Los compuestos así formados se denominan *compuestos de intercalación de grafito*. La interacción electrónica con las hojas de carbono de grafito de la estructura anfitriona conduce en general, a un marcado aumento de la conductividad eléctrica en el plano, aunque esto puede ser contrabalanceado por la presencia de defectos originalmente presentes o formados durante el proceso de intercalación. Aún cuando esto no está suficientemente reconocido en la literatura, debería tenerse en cuenta que, en general, estos compuestos de intercalación grafiticos tienen un rango más o menos amplio de composiciones y son *compuestos no-estequiométricos*.

El término compuesto(s) de intercalación grafitico se ha abreviado como GIC en la literatura sajona. A los fines de evitar confusiones en las búsquedas por computadora, es recomendable que se evite esta abreviatura porque IC generalmente se emplea para circuito integrado.

II-6.2 VOCABULARIO

II-6.2.1 La reacción

El término *intercalación* se usa para describir el proceso total por el cual se forma un compuesto sin pérdida de la planaridad de las láminas de átomos de carbono, con heteroátomos o moléculas localizadas entre las hojas originales de carbono, etc., tal como se describe en la Sección II-6.1 previa. El proceso inverso, es decir, la pérdida de algunas o todas las especies intercaladas, por los medios que sean, se denomina *de-intercalación* o *desintercalación*.

II-6.2.2 La capa intercalada

En la química de la intercalación grafitica el término intercalado se debe referir al huésped (por ejemplo, potasio o bromo) y no a la especie anfitriona (grafito). Consecuentemente, la descripción "potasio (o bromo) intercalado en grafito" es correcta, pero no lo es "grafito intercalado". El tiempo verbal intercalante no se debería usar para describir un estado sino un proceso, por lo cual "potasio intercalante" describe a los átomos que están reaccionando con grafito para llegar a ser finalmente "potasio intercalado". Para prevenir posibles ambigüedades, el sustantivo intercalante se debe evitar. Sin embargo, por analogía con una recomendación de IUPAC (Nota 6b), intercalado puede ser empleado para describir el huésped intercalado en el retículo huésped.

II-6.2.3 Las capas de carbono

El término grafito designa a un mineral tanto como a la estructura cristalina de todas las formas del carbono elemental. En el grafito, las hojas planares de átomos de carbono, con cada átomo unido a tres vecinos en una estructura no compacta tipo panel, están

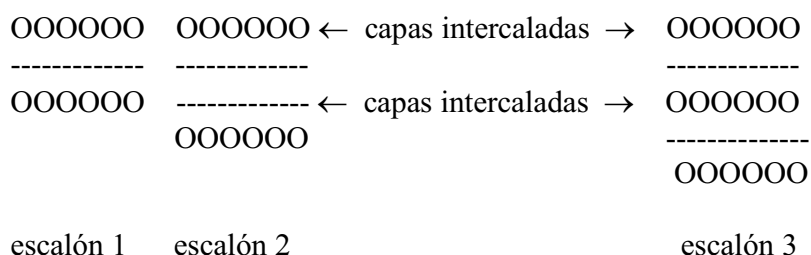
Nota 6b : Comparar con el término "adsorbato" en "Definitions, Terminology and Symbols in Colloid and Surface Chemistry". Pure & Appl.Chem. **31**, 577 (1972), Sección 1.1.4; **54**, 2201 (1982) Sección 1.2.1.

apiladas regularmente con un orden tridimensional (Nota 6c). El término "carbono grafitico" sólo es aplicable a materiales que dan origen al menos a una modulación de las reflexiones hk en la difracción de rayos X. Entonces no es correcto hablar de láminas de grafito con el significado de hojas sencillas bidimensionales. Aún los términos capa de carbono y hoja de carbono son inapropiadas.

El sufijo *-eno* se emplea para los hidrocarburos policíclicos aromáticos fundidos, aún cuando la raíz del nombre es de origen trivial, como: naftaleno, antraceno, coroneno, etc. Una capa simple de estructura grafitica se puede considerar como el miembro final de esta serie y el término grafeno debería usarse para designar a las capas individuales de carbono en los compuestos de intercalación grafiticos.

II-6.2.4 Escalones

Una peculiaridad de los compuestos de intercalación grafiticos es su tendencia a formar estructuras regularmente empaquetadas en las cuales lo intercalado se encuentra solamente en una fracción del espacio entre las hojas del grafeno. En un compuesto formado en una primera etapa de intercalación (st.1), las capas simples de grafeno se alternan regularmente con capas sencillas de especies intercaladas (las últimas puede ser de más de un átomos de espesor). En un compuesto formado en una segunda etapa de intercalación (st.2), tercera (st.3), etc., dos, tres, etc. capas de grafeno separan dos sucesivas del intercalado.



De acuerdo con las reglas aceptadas (Nota 6d), la unidad que forma un polímero por una sucesión continua, se denomina unidad repetitiva constitucional (CRU) (ver también Capítulo II-7). Por analogía, la secuencia de hojas de una etapa, tal como se mostró más arriba, debería ser la CRU de un compuesto de intercalación de grafito.

En otro modelo estructural, los compuestos de segunda, tercera, etc. etapas, se caracterizan por el hecho de que el área sobre la cual se encuentra la capa de especies intercaladas entre pares de capas de grafeno sucesivas, es la mitad, un tercio, etc. del área interlaminar. (Nota 6e).

En contraste con los compuestos de intercalación producidos por otras especies tal como el TaS₂, se han observado un alto número de etapas (10, 11, etc.) con compuestos de intercalación de grafito, así como compuestos con números fraccionarios de etapas (en los cuales, por ejemplo y con referencia al primer modelo estructural descrito previamente, dos

Nota 6c : Ver International Committee for Characterisation and Terminology of Graphon: First Publication of 30 Tentative Definitions, Terms No.3 and 6; *Carbon*, **20**, 445 (1982).

Nota 6d : Basic Definitions of Terms Relating to Polymers, 1974 *Pure Appl. Chem.* **40**, 477 (1974).

Nota 6e : A. Hérol, *Crystallochemistry of Carbon Intercalation Compounds*, in *Intercalated Layered Materials* (F. Lévy, ed.), D. Reidel, Dordrecht, 1979, pp.323-421 (en particular ver página 400).

o más espacios intercapas contienen al intercalado) o con números medios de etapas. En tales casos, se debería dar una descripción y una explicación completas en el texto. Asimismo, se debería hacer una clara distinción entre estos casos y fallas de empaquetado ocasionales.

II-6.3 CLASIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS DE INTERCALACIÓN GRAFÍTICOS

II-6.3.1 Compuestos donores y aceptores

En los compuestos de intercalación de grafito, las capas de grafeno donan electrones o los aceptan de las especies intercaladas. Sin embargo, ahora generalmente se acepta que la descripción del intercambio electrónico en estos compuestos debería especificarse desde el punto de vista de las propiedades donoras oceptoras de las especies intercaladas en vez que desde la perspectiva de las capas del grafeno, tal como es costumbre con los semiconductores dopados. Así, el potasio-grafito es entonces un compuesto de intercalación grafitico donador, mientras que el bromo-grafito o pentafluoruro de arsénico-grafito o grafito-sulfato de hidrógeno son compuestos aceptores.

Para el caso de los compuestos grafiticos de intercalación en los cuales distintas especies localizadas en regiones específicas del espacio interlaminar soportan cargas de signos opuestos, se puede emplear la descripción de compuesto de intercalación mixto donador-aceptor.

La extensión de la transferencia de carga frecuentemente se ha definido por la fracción de especies intercaladas llevando una carga. Esta práctica es desaconsejada en vista de la naturaleza no estequiométrica de los compuestos de intercalación de grafito. Asimismo, en muchos casos las capas del intercalado se sabe que difieren en orden y densidad. Entonces es recomendable que la transferencia de carga sea definida por la carga media aceptada o donada por átomo de carbono de la capa de grafeno. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que en etapas mayores la segunda, la mayor parte de la carga puede estar concentrada sobre las capas del grafeno inmediatamente adyacentes a las capas intercaladas. Los autores deberían especificar cómo se define el valor de la carga transferida.

II-6.3.2 Sales de grafito

Siguiendo el uso establecido desde hace bastante tiempo, el nombre sal de grafito puede ser dado a una subclase de compuestos aceptores de fórmula $C_m^+X^-n$ HX, en el cual HX representa una molécula de un ácido de Brönsted. Este nombre refleja el hecho de que estos compuestos se sabe que contienen iones discretos, tales como HSO_4^- ó NO_3^- , lo cual es evidente a partir del método de preparación que involucra la intercalación de las capas del grafeno por medios químicos o electroquímicos en presencia del ácido. El espacio entre los aniones en las capas intercaladas está llena de moléculas del ácido.

De igual manera, los compuestos que contienen capas catiónicas intercaladas, con las capas del grafeno negativamente cargadas, han sido llamadas grafitidos, de acuerdo con las recomendaciones aplicables a los nombres de sales de aniones no complejos. En vista de los argumentos desarrollados en la Sección II-6.2.3, el nombre grafenido sería más apropiado.

II-6.3.3 Compuestos binarios, ternarios, cuaternarios, etc.

El orden de un compuesto de intercalación grafitico indica el número de componentes en el mismo: compuestos binarios son aquellos que contienen una sola especie química además del carbono en el grafito original, es decir, en la cual el número total de especies es dos. En relación a este punto, los iones derivados de un átomo neutro intercalado y co-intercalado con él (como en las sales de grafito de la Sección II-6.3.2) no se considerarán como especies químicas distintas. Los compuestos de intercalación grafiticos ternarios, cuaternarios, etc. contienen respectivamente dos, tres, etc. especies químicas diferentes además del carbono original del grafeno.

II-6.3.4 Compuestos de multi-intercalación

El término compuesto de bi-intercalación describe a un compuesto de intercalación grafitico ternario en el cual dos huéspedes ocupan espacios interlaminares separados de la estructura del anfitrión.

Por ejemplo:

```

OOOOOO
-----
XXXXXXXXX
-----
OOOOOO

```

Esta nomenclatura se aplica, con modificaciones apropiadas, a compuestos en los cuáles tres, cuatro, etc. huéspedes diferentes ocupan espacios interlaminares sucesivos de la estructura del anfitrión, formando compuestos de tri-intercalación, tetra-intercalación, etc. Estos términos no se aplican a las soluciones sólidas con una especie huésped en las capas intercaladas de otra especie de huésped.

II-6.3.5 Heteroestructuras

Algunos intentos al preparar compuestos ternarios dan como resultado la formación de dos fases, verificables por la presencia de sus respectivos patrones de difracción de rayos X. Como los dominios individuales son de dimensión microscópica la separación mecánica de las dos fases está excluida por lo cual estas mezclas pueden ser descritas como heteroestructuras.

II-6.4 DESCRIPCIÓN NO BASADA EN LA FÓRMULA DE LOS COMPUESTOS DE INTERCALACIÓN GRAFÍTICOS

El nombre de un compuesto de intercalación de grafito está formado por la combinación del nombre grafito con el nombre de la sustancia intercalada, separados por un guión largo. Si es necesario, se pueden agregar la composición y la etapa entre paréntesis. El número de oxidación de un elemento se puede especificar. En una descripción no basada en la fórmula, la costumbre es poner primero a la especie intercalada huésped, sea donora o aceptora. En algunos casos (especialmente con las sales de grafito), es recomendable que el nombre grafito se coloque primero (*vide infra*), sin guión entre él y el nombre del anión.

Ejemplos:

1. litio-grafito (1/6, st.1)
2. potasio-grafito (1/24, st.2)
3. monocloruro de yodo-grafito ($\approx 1/8$, st.2)
4. cloruro de hierro (III)-grafito ($\approx 1/18$)
5. grafito tetracloroaurato(III)

Los compuestos pueden exhibir un rango considerable de composiciones y la constitución exacta sólo debería darse cuando la muestra bajo consideración se ha analizado. Similariamente, las dudas respecto del valor exacto del número de escalones hacen que no se de este dato.

En los compuestos ternarios que contienen moléculas co-intercaladas que solvatan al anión o al catión entre las capas del grafeno, los nombres de las moléculas siempre son colocados luego de las especies solvatadas.

Ejemplos:

6. potasio-benceno-grafito (1/2, 2/24, st.1)
7. grafito tetrafluoroborato-tetrahidrofurano

II-6.5 FORMULACIÓN DE LOS COMPUESTOS DE INTERCALACIÓN GRAFÍTICOS

Las fórmulas deberían especificarse sólo si son conocidas con precisión, por lo que en cualquier otro caso es preferible la descripción no basada en la fórmula, tal como potasio-grafito (st.2). Asimismo, no se debería dar el número de la etapa si la misma está indefinida.

El constituyente electropositivo debe ser colocado primero en la fórmula, de acuerdo a las recomendaciones de la Sección I-6.4.1.2 (Nota 6f).

Ejemplos:

1. SrC_6 (st.1) estroncio-grafito (1/6, st.1)
2. $\text{FeC}_{14}\text{Cl}_3$ (st.2) Cloruro de hierro(III)-grafito (1/14, st.2)

En los compuestos ternarios o de mayor orden, los constituyentes similares aparecen en la fórmula en orden alfabético del símbolo químico.

Ejemplo:

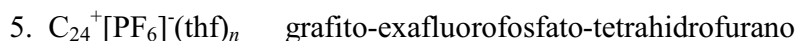
3. $\text{Cs}_{1-x}\text{K}_x\text{C}_8$ (st.1) cesio-potasio-grafito (st.1)

Con los iones solvatados, el símbolo de las moléculas solvatantes sigue al del ión

Ejemplos:

4. $\text{Ba}(\text{NH}_3)_{2.5}\text{C}_{10.9}$ (st.1) bromo-amoniaco-grafito (1/1.5/10.9 st.1)

Nota 6f : *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.



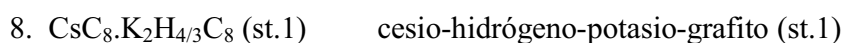
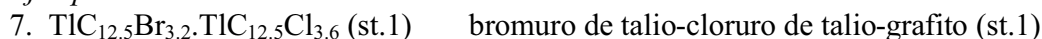
También es posible especificar las moléculas intercaladas luego de un punto central.

Ejemplo:



La bi-intercalación (es decir, cuando hay diferentes especies intercaladas en distintos espacios entre capas) deberían ser aparentes en la fórmula.

Ejemplos:



Es deseable que cualquier no-estequiometría de los compuestos de intercalación también se exprese en la formulación. Así, $K_{1-x}C_8$ implica que algunos de los átomos de potasio faltan en las capas bidimensionales intercaladas de KC_8 . Una estructura mensurable implica necesariamente un número entero de átomos de carbono y si, por ejemplo, $x = 0.1$ en $K_{1-x}C_8$, sería incorrecto dar la fórmula $KC_{8.9}$. De igual manera, la fórmula $NiC_{13.2}Cl_{2+x}$ implica (i) que hay un exceso de cloro con respecto a la estequiometría entera $Cl/Ni = 2$, y (ii) que no existe una relación entera para el número de átomos de C para cada átomo Ni en el cloruro de níquel(II)-grafito. Entonces, las capas intercaladas de $NiCl_2$ no son conmensurables con respecto a las capas de grafeno.

Sin embargo, debería reconocerse que no siempre es posible indicar sin ambigüedades por medio de una fórmula química si una dada estructura es conmensurable o no con las capas del grafeno. Además, surge una ambigüedad a partir del uso de los índices no enteros en las fórmulas. Mientras que el índice 0.8 en $Li_{0.8}C_6$ significa que sólo el 80% de los sitios de Li en la primera etapa del derivado litio grafito están ocupados, el mismo índice en $K(furano)_{0.8}C_8$ da el contenido máximo actual de las moléculas de furano porque éstas ocupan *todo* el espacio disponible, y no el 80% del mismo. Si la información adecuada está disponible, el tipo de defecto responsable de la estequiometría no entera se puede indicar usando la notación estándar, es decir, V para vacancias e i para intersticios (Sección I-6.4.2 de la Nota 6e).

II-6.6 NOTACIÓN ESTRUCTURAL

II-6.6.1 Descripción de la secuencia de empaquetamiento

En la forma exagonal del grafito, las capas del grafeno están empaquetadas de manera tal que todas las capas pares desplazadas con respecto a las capas impares por un tercio del parámetro cristalográfico, tal como se refleja en la notación ABAB De igual forma, las capas de grafeno en distintas posiciones relativas se pueden indicar por las letras mayúsculas (A, B, C, ...). Para las capas intercaladas, se debería hacer una distinción entre los dos casos siguientes:

- para capas conmensurables en la epitaxis de las capas del grafeno, se pueden usar letras griegas minúsculas (α , β , γ , ...) para distinguir entre capas individuales.

- las capas no comensuradas o desordenadas se pueden identificar con χ (chi) o ξ (xi).

Así, la estructura del LiC_6 (st.1) se describe como $\text{C}\alpha\text{C}\alpha\text{C}\alpha\dots$, mientras que KC_8 (st.1), más correctamente formulado como $(\text{KC}_8)_4$ (st.1) se describe como $\text{C}\alpha\text{C}\beta\text{C}\gamma\text{C}\delta$.

II-6.6.2 Descripción del retículo cristalino

La simetría del retículo cristalino de una dada etapa se puede indicar por el sistema Gard modificado (Nota 6g) (ya usado para otros politipos), con un número arábigo y una letra mayúscula precediendo la fórmula química. El símbolo numérico indica el número de las unidades repetitivas constitucionales (CRU) en el período identificatorio, y la letra indica la simetría (H = exagonal, T = trigonal con índice de Bravais exagonal, R = trigonal con retículo de Bravais romboédrico, O = ortorrómbico).

Ejemplos:

1. 1H- LiC_6 (st.1) secuencia de empaquetado $\text{A}\alpha\text{A}\alpha\text{A}\dots$
2. 2H- KC_{24} (st.2) secuencia de empaquetado $\text{A}\text{B}\chi\text{B}\text{A}\chi\dots$
3. 3R- CsC_8 (st.1) secuencia de empaquetado $\text{A}\alpha\text{A}\gamma\text{A}\dots$
4. 4O- KC_8 (st.1) secuencia de empaquetado $\text{A}\alpha\text{A}\beta\text{A}\gamma\text{A}\delta\dots$

II-6.6.3 Descripción de la capa epitaxial

La relación ordenada entre las capas de grafeno y las capas intercaladas en los planos (a, b) se indican por la notación para las sobrecapas epitaxiales (Nota 6h). La medida de la nueva celda unidad, normalizada con respecto a los parámetros a y b de las capas de grafeno, se da entre paréntesis, y la rotación con respecto a la celda unidad de grafito se indica por $R \theta$ (en grados).

Ejemplos:

1. LiC_6 (st.1); $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) R 30^\circ$
2. KC_8 ; (2×2)
3. CsC_{28} (st.2); $(\sqrt{7} \times \sqrt{7}) R 19.1^\circ$

II-6.6.4 Símbolos para varias distancias

El símbolo I_c , empleado a menudo en la literatura para indicar el espesor de la CRU (de decir, indica la distancia entre dos capas intercaladas sucesivas), puede ser confundido con I , el cual se emplea para la celda unidad centrada en el cuerpo. Para adaptarse a los símbolos cristalográficos aceptados, se deberían usar los siguientes símbolos:

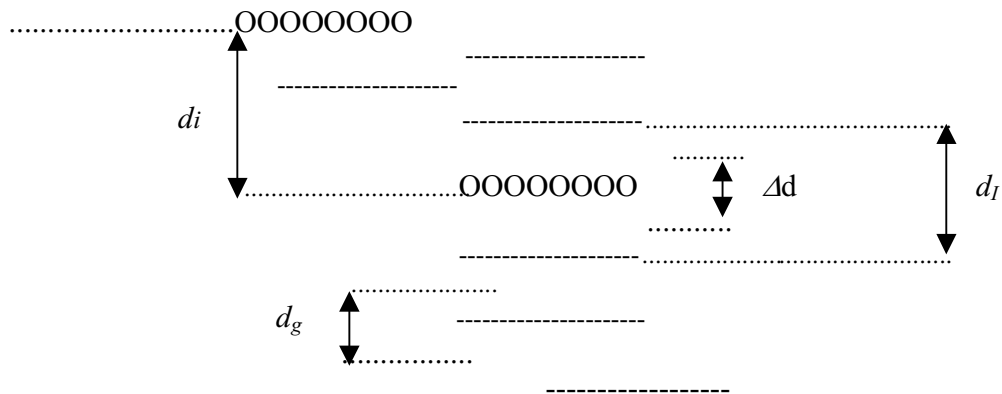
- d_G es la distancia entre dos capas sucesivas de carbono en el grafito, por lo cual $d_G \approx 335$ pm;
- d_i es la distancia entre dos capas sucesivas del intercalado; esto no es necesariamente el período de identidad cristalográfico c , el cual será un múltiplo de

Nota 6g : Nomenclature of Polytype Structures of the International Union of Crystallography *ad hoc* committee on the nomenclature of disordered, modulated and polytype structures *Acta Cryst. Sec. A*, **A40**, 399 (1984).

Nota 6h : E. A. Wood, *J. Appl. Phys.* **35**, 1306 (1964); R. J. Estrup and M. G. McRae, *Surf. Sci.* **25**, 1 (1972) (en particular p.33).

d_i si los ejes de giro o los vectores de traslación están presentes; así, en el caso de $(\text{KC}_8)_4$, $c \approx 2160 \text{ pm} = 4 \times d_i$;

- d_g es la distancia entre dos capas adyacentes del grafeno si ésta se encuentra que es diferente de 335 pm;
- d_I es la distancia repetida del primer compuesto escalón con la misma capa del intercalado como aquel en la compuesto de intercalación bajo consideración, independientemente de que exista el primer compuesto escalón pueda existir o no;
- Δd es el espesor aparente de la capa intercalada, dada por $\Delta d = d_I - d_g$ o $\Delta d = d_I - d_g$.
- d_∞ es el plano de la distancia C-C en la capa de grafeno; no es necesariamente la misma distancia como en el grafito ($\approx 142.1 \text{ pm}$) debido a la transferencia de carga causada por la intercalación;
- $\Delta d_\infty = u = d_\infty - 142.1 \text{ pm}$ es la variación de la distancia en el plano C-C debida a la transferencia de carga.



II-7 HÉLICES REGULARES SIMPLES Y CUASI SIMPLES Y POLÍMEROS DE COORDINACIÓN INORGÁNICOS

CONTENIDOS

- II-7.1 Introducción
- II-7.2 Principios fundamentales
 - II-7.2.1 Identificación de la unidad repetitiva constitucional (CRU)
 - II-7.2.2 Orientación de la CRU
 - II-7.2.3 Denominación de la CRU
- II-7.3 Recomendaciones
 - II-7.3.1 El nombre del polímero general
 - II-7.3.1.1 El uso de poli y corchetes cuadrados
 - II-7.3.1.2 Prefijos numéricos
 - II-7.3.1.3 Uso del término catena
 - II-7.3.1.4 Especificación de los grupos terminales
 - II-7.3.2 Reglas de prioridad para la selección de una unidad repetitiva constitucional preferencial
 - II-7.3.2.1 Elección de la subunidad constituyente prioritaria
 - II-7.3.2.2 Elección de la dirección preferencial a lo largo de la cadena polimérica para la cita secuencial de las subunidades constituyentes de la CRU
 - II-7.3.3 Hélices inorgánicas regulares simples y polímeros de coordinación
 - II-7.3.3.1 CRUs con esqueletos homoatómicos
 - II-7.3.3.2 CRUs con esqueletos consistentes de un átomo central y un ligando puente
 - II-7.3.3.3. CRUs consistentes de más de un átomo central y no más de un ligando puente ligando entre cada átomo central del polímero
 - II-7.3.4 Polímeros de coordinación en hélice regular cuasi-simple
 - II-7.3.4.1 CRUs con esqueletos consistentes de un átomo central y dos o más ligandos puente o ligandos quelantes
 - II-7.3.4.2 CRUs conteniendo más de un átomo central
 - II-7.3.5 Polímeros de coordinación en hélice sencilla y cuasi sencilla con centros de coordinación polinucleares
 - II-7.3.6 Polímeros inorgánicos y de coordinación en hélices sencillas y cuasi-sencillas con CRUs iónicos
 - II-7.3.7 Configuración estereoquímica de un CRU
 - II-7.3.8 Grupos terminales de los polímeros inorgánicos o de coordinación
 - II-7.3.8.1 Uso de los términos α y ω
 - II-7.3.8.2 Elección de grupos terminales
 - II-7.3.8.3 Grupos terminales iónicos

II-7.1 INTRODUCCIÓN

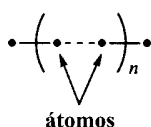
El sistema previamente descrito para nombrar a los polímeros en términos de su estructura (Nota 7a y Nota 7b) ha estado asociado con los polímeros orgánicos lineales, primariamente aquellos definidos como polímeros de hélices simples (Nota 7b) y ha seguido tan estrechamente como es posible a los principios establecidos de la nomenclatura orgánica (Nota 7c). Consecuentemente, las subunidades constituyentes de la más pequeña unidad estructural repetitiva, nombradas como grupos bivalentes sustituyentes, se combinan aditivamente para formar el nombre de la unidad repetitiva constitucional. La extensión de este método a polímeros lineales inorgánicos y/ de coordinación está seriamente limitada por la carencia general de un sistema para nombrar grupos sustituyentes bivalentes, debido parcialmente a la diferencia básica en la filosofía entre los sistemas de nomenclatura inorgánica y orgánica, y parcialmente debido a que las unidades constituyentes de la unidad repetitiva constitucional en la mayoría de los polímeros inorgánicos y de coordinación no son grupos sustituyentes bivalentes en el sentido usual.

El sistema presentado aquí está basado en recomendaciones previas (Nota 7d) y está designado para asignar un nombre único y sin ambigüedades a polímeros lineales inorgánicos y/o de coordinación. Las subunidades constituyentes están formuladas de acuerdo a los principios químicos usuales de enlace covalente y/o coordinado, y las estructuras están descriptos por una unidad repetitiva constitucional con la menos una subunidad terminal constituyente que está conectada a través de un solo átomo a las otras unidades repetitivas constitucionales repetitivas idénticas o a un grupo terminal. Así, las estructuras escalera están excluidas.

Un polímero regular lineal que puede ser descrito por una unidad repetitiva constitucional preferida en la cual ambas subunidades constituyentes terminales están conectadas a través de átomos simples a las otras unidades repetitivas constitucionales idénticas o a un grupo terminal se denomina polímero de hélice sencilla regular (ver Nota 7b).

Ejemplo:

1.



Un polímero regular lineal que puede ser descrito por una unidad repetitiva constitucional preferida en la cual sólo una subunidad constituyente terminal está conectada a través de un solo átomo a las otra unidades repetitivas constitucionales idénticas o a un

Nota 7a : *Macromolecules*, **1**, 193 (1968).

Nota 7b : IUPAC Information Bulletin Appendices on Tentative Nomenclature, Symbols, Unist and Standards, No 29, Nov., 1972; *Macromolecules*, **6**, 149 (1973); *Pure Appl. Chem.*, **48**, 373 (1976).

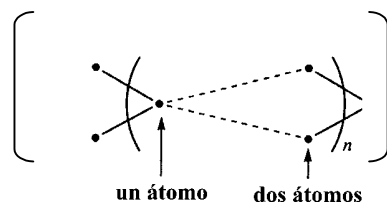
Nota 7c : *Nomenclature of Organic Chemistry*, Pergamon Press, Oxford, 1979; (a) Recommendation B6.22, pp. 411-412; (b) Recommendation A1.1, p.5

Nota 7d : *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990; Section I10.8.4. Ver también W. V. Metanovski en *Compendium of Macromolecular Nomenclature*, 1st Edition, Blackwell Scientific Publication, Oxford, 1991.

grupo terminal es un polímero de hélice cuasi-sencilla, esto significa que, a pesar de no ajustarse a la definición de polímero regular de hélice simple (Nota 7b) puede nombrarse en la misma forma.

Ejemplo:

2.



Los principios establecidos en la nomenclatura inorgánica y de los compuestos de coordinación (Nota 7d) se usan en tanto sean consistentes con las definiciones (Nota 7e) y los principios básicos (Notas 7a y 7b) ya publicados de la nomenclatura de los polímeros. Como en la nomenclatura de los polímeros orgánicos, estas recomendaciones se aplican a estructuras, no sustancias, que puedan ser representaciones idealizadas de sistemas complejos. Las sustancias poliméricas usualmente incluyen un número de estructuras diferentes, y una descripción completa de una molécula polimérica tendría que incluir tales ítems como el grado de regularidad estérica, imperfecciones de cadenas, ramificaciones aleatorias, etc., resultando así una nomenclatura extremadamente compleja. En cualquier caso, es útil considerar un polímero en términos de una estructura simple que pueda ser idealizada. En la medida de que un polímero inorgánico o de coordinación pueda ser representado como una combinación lineal de unidades constitucionales (estructurales) repetitivas regularmente, se lo puede nombrar de acuerdo a las siguientes recomendaciones. Si se lo desea, los grupos terminales pueden ser incluidos.

Unos pocos polímeros con esqueletos inorgánicos en los cuales el enlace es primariamente covalente tienen nombres triviales o semi-sistemáticos, por ejemplo, poli(dimetilsiloxano) para el $\{-\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{-O-}\}_n$ (Nota 7f) y poli(diclorofosfaceno) para el $\{-\text{PCl}_2=\text{N-}\}_n$ (ver Nota 7g); algunos de estos polímeros también se pueden nombrar por los principios aplicables a los polímeros orgánicos, es decir, usando grupos sustituyentes bivalentes (Notas 7a y 7b), como en: poli[oxi(dimetilsilileno)] para $\{-\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{-O-}\}_n$, y poli[nitrilo(diclorofosforanilidino)] para $\{-\text{PCl}_2=\text{N-}\}_n$ (ver Nota 1b, p.10). No hay objeción al uso de nombres basados en los principios para nombrar a los polímeros orgánicos, si los nombres para los grupos sustituyentes bivalentes en la estructura están claramente

Nota 7e : *Pure Appl. Chem.*, **40**, 479 (1974): (a) término 3.3, p.482.

Nota 7f : Los nombres de los polímeros del siloxano están basados en una unidad repetitiva $\text{SiH}_2\text{-O-}$ llamada siloxano la cual, junto con los nombres de los sustituyentes, se encierra entre paréntesis o corchetes y precedidos del prefijo poli. Los polímeros de siloxano de bajo peso molecular se pueden nombrar empleando el prefijo oligo o un prefijo numérico en lugar de poli tal como se describe en las recomendaciones para polímeros orgánicos (Notas 7a y 7b). Por otra parte, los nombres de siloxanos acíclicos específicos de bajo peso molecular con fórmula general $\text{H}_2\text{Si}[\text{-O-SiH}_2\text{-}]_n\text{O-SiH}_3$ se forman de acuerdo con la Recomendación D 6.22 (Nota 7c). Esto da como resultados nombres similares pero no idénticos. Por ejemplo, cuando $n = 2$ en la fórmula general previa, el nombre debería ser tetrasiloxano. En estos nombres, los sustituyentes se citan como prefijos para tales nombres vinculados, por ejemplo decametiltetrasiloxano.

Nota 7g : Este nombre es un híbrido de la nomenclatura aditiva y sustitutiva que no satisface las recomendaciones de ambos sistemas.

establecidos. Sin embargo, para algunas estructuras el uso de las recomendaciones dadas más abajo suministran nombres no ambiguos con mucha menor artificialidad.

II-7.2 PRINCIPIOS FUNDAMENTALES

Este sistema de nomenclatura para polímeros inorgánicos y de coordinación de hélices regulares sencillas y cuasi sencillas está gobernado por los mismos principios fundamentales de la nomenclatura de polímeros desarrollados para polímeros orgánicos de hélices sencillas (Nota 7a y Nota 7h). El mismo está basado en la selección y la denominación de una unidad repetitiva constitucional (CRU), definida (Nota 6e) como la más pequeña unidad estructural, cuya repetición describe la estructura del polímero. El nombre del polímero es el nombre de esta unidad repetitiva prefijada por los términos *poli*, *catena* u otro indicador estructural, y si se lo desea, designaciones para los grupos terminales.

El nombre de la CRU se forma citando, en orden de aparición a lo largo de la cadena de la CRU, los nombres de sus subunidades constituyentes, que son los fragmentos estructurales más largos de la CRU que pueden ser nombrados por los principios establecidos por la nomenclatura inorgánica y/o de coordinación (Nota 7i). Concordantemente, los ligandos de puentes no se rompen en subunidades más pequeñas que aquéllas nombradas por los principios de la nomenclatura de coordinación para los ligandos (Nota 7d).

Aunque este procedimiento resultará en un nombre sin ambigüedades, ello no dará necesariamente un solo nombre. Para obtener un solo nombre, se debe seleccionar uno simple preferencial por CRU. Esto se puede lograr por el siguiente procedimiento:

- (a) identificar el CRU y sus subunidades constituyentes;
- (b) orientar el CRU, para lo cual se debe determinar la subunidad que comenzará la cita del CRU y la dirección para proceder a lo largo del esqueleto de la cadena polimérica escribiendo el resto del CRU de izquierda a derecha;
- (c) nombrar el CRU en dos pasos básicos:
 - (i) nombrar las subunidades por los principios establecidos de la nomenclatura inorgánica y/o de coordinación
 - (ii) ordenar los nombres de las subunidades de acuerdo a la dirección preferencial de citas para formar el nombre de la CRU.

(Es importante identificar y orientar el CRU tanto como sea posible antes de disponer el nombre de la CRU. Sin embargo, ocasionalmente la elección de una orientación única dependerá de los nombres de las subunidades individuales).

Nota 7h : Ver también A. D. McNaught and A. Wilkinson, *Compendium of Chemical Terminology*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997 and Glossary of Basic Terms in Polymer Science, *Pura Appl. Chem.*, **68**, 2287 (1996).

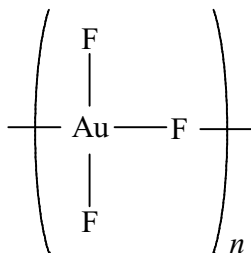
Nota 7i : En las reglas para nombrar polímeros orgánicos (Notas 7a y 7b), las subunidades constituyentes de la CRU son los fragmentos estructurales más largos que pueden ser nombrados como grupos sustituyentes bivalentes o multivalentes de acuerdo a los principios establecidos de la nomenclatura orgánica (Nota 7c). Los átomos centrales simples, los centros de coordinación mononucleares y los ligandos de puente son subunidades constituyentes de las CRUs en los polímeros regulares de hélices simple y cuasi simple inorgánicos y de coordinación. Los centros de coordinación polinucleares usan como subunidades sólo bajo ciertas condiciones (ver discusión en la Sección H7.2.3).

II-7.2.1 Identificación de la unidad repetitiva constitucional (CRU)

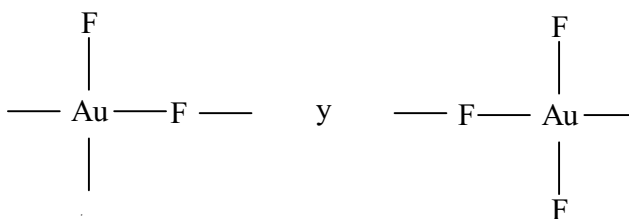
En muchos casos, la estructura del polímero es lo suficientemente sencilla como para que la CRU y sus subunidades constitutivas puedan ser rápidamente identificadas.

Ejemplo:

En el polímero



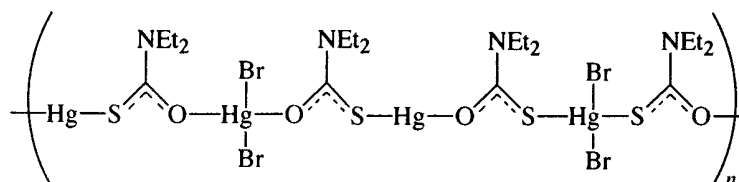
las dos CRUs posibles son:



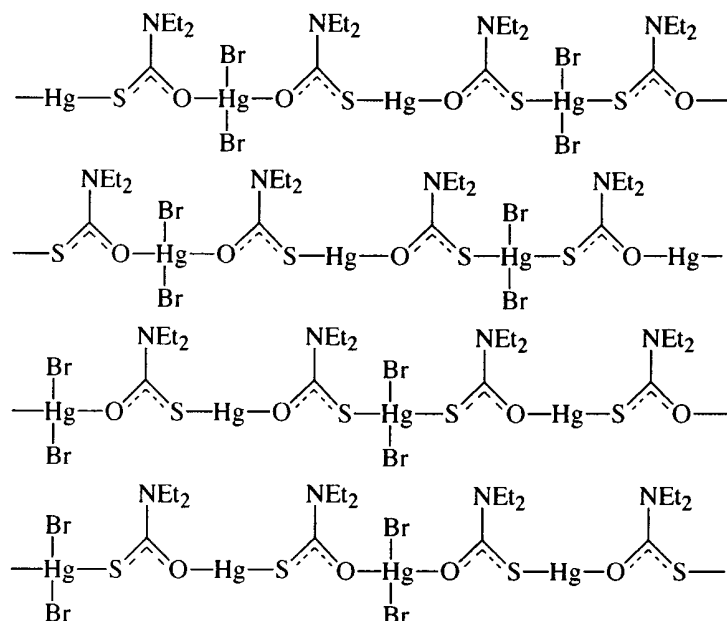
Sin embargo, en casos más complejos y ocasionalmente en algunos casos simples puede ser necesario dibujar un segmento relativamente largo de la cadena del polímero para identificar a las posibles unidades constitucionales repetitivas.

Ejemplos:

1. En el polímero $\text{---}(\text{---Ag---CN---Ag---CN---})_n\text{---}$, las posibles unidades constitucionales repetitivas son ---Ag---CN--- ; ---Ag---NC--- ; ---CN---Ag--- ; y ---NC---Ag--- (como ya se ha establecido al considerar que el ligando puente ---CN--- no se rompe en subunidades más pequeñas).
2. En el polímero



Las unidades repetitivas constitucionales posibles son:



II-7.2.2 Orientación de la CRU

La subunidad constituyente de la CRU en la cual empieza su cita, es el átomo central (o centro de coordinación) de mayor prioridad, es decir el átomo central preferido de acuerdo al conjunto de las reglas jerárquicas dadas en la Sección II-7.3.2 que viene más abajo. Normalmente, el centro es escrito como la subunidad terminal izquierda de la CRU.

La dirección preferida a lo largo de la cadena polimérica desde la subunidad preferencial para la cita secuencial (de izquierda a derecha) de las otras subunidades constitutivas en la CRU está gobernada por tres factores centrales considerados en orden hasta que se alcanza una decisión definitiva.

- Una CRU de hélice simple se prefiere a una CRU cuansi-simple. Por ejemplo, en el caso de una CRU con ambas subunidades constituyentes terminales conectadas a otras unidades repetitivas constituyentes idénticas o a un grupo terminal por medio de átomos simples, se prefiere a una CRU con sólo una subunidad constituyente terminal conectada a otras unidades constitucionales repetitivas o a un grupo terminal por medio de un átomo simple.
- La dirección preferida se define como el camino más corto, medido en términos del número de átomos, en el esqueleto polimérico desde la subunidad preferencial a una subunidad de igual prioridad, o a una subunidad próxima en preferencia.
- Cuando todos los caminos entre la subunidad prioritaria y una subunidad de igual prioridad, o a una subunidad próxima en clasificación prioritaria, son de igual longitud, la dirección preferida es a lo largo del camino que incluye a las subunidades constitutivas de mayor prioridad. Los caminos entre subunidades de igual prioridad o entre la subunidad prioritaria y la subunidad que sigue en prioridad necesariamente involucra subunidades de menor prioridad, y a menudo consistirá de ligandos orgánicos. Entonces, el orden jerárquico de subunidades prescripto de los polímeros

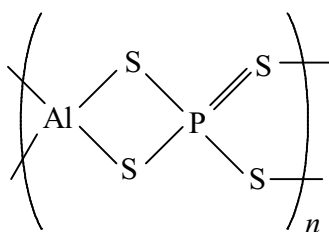
orgánicos lineales (Notas 7a y 7b) puede ser necesario para determinar la dirección preferida.

Mayores refinamientos a los principios generales se dan en la Sección II-7.3.2 y se ilustran en secciones subsecuentes que tratan acerca de la denominación de polímeros específicos.

II-7.2.3 Denominación de la CRU

El nombre de una CRU de un polímero inorgánico o de coordinación de hélice simple o cuasi-simple se basa en un esqueleto consistente de átomos centrales y ligandos puentes si están presentes. Todos los polímeros inorgánicos o de coordinación tienen uno o más átomos centrales, pero pueden o no poseer ligandos puentes. Se considera que los polímeros inorgánicos homoatómicos consisten de átomos centrales solamente. Los centros de coordinación, mononucleares o polinucleares, y sus ligandos asociados, excepto para ligandos entre átomos centrales en el esqueleto, si los hay, se nombran por los principios usuales de la nomenclatura de coordinación. Los ligandos de puente se nombran como ligandos prefijados por la letra griega μ .

La selección de los fragmentos estructurales más largos en el esqueleto a los que pueden ser asignados nombres de grupos sustituyentes multivalentes como subunidades de una CRU es un principio fundamental en la denominación de los polímeros orgánicos lineales. Para nombrar polímeros inorgánicos o de coordinación, este principio se aplica en la selección de los ligandos puente en la CRU. Cuando hay una elección, se escoge el grupo mayor que puede ser nombrado por los métodos aceptados para nombrar ligandos polidentados. Por ejemplo, en el polímero mostrado debajo, la CRU podría ser considerada como dos átomos centrales conectadas por ligando de azufre.



Sin embargo, el principio del ligando puente más largo requiere que el ligando puente sea el tetratiosfato(3-). La aplicación estricta de este principio a los polímeros inorgánicos o de coordinación conduciría a la selección de los centros de coordinación polinucleares como el fragmento estructural más largo en el esqueleto. Como no hay reglas aceptadas oficialmente para nombrar y/o numerar de forma única ciertos tipos de centros de coordinación polinuclear no es conveniente aún en algunos casos usar centros de coordinación polinuclear como subunidades de una CRU en los polímeros inorgánicos y de coordinación. Entonces, el principio de la subunidad más larga no siempre es aplicable a los centros de coordinación de una CRU y en este conjunto de recomendaciones los centros de coordinación polinuclear se emplean como subunidades de las CRUs sólo cuando *no* es conveniente expresar tales unidades estructurales en términos de sus centros de coordinación mononucleares (ver Sección II-7.3.5). Sin embargo, a los fines ilustrativos, los nombres empleando subunidades polinucleares se dan como alternativas para algunos de los ejemplos en las recomendaciones que siguen.

Una vez que los nombres de las subunidades constituyentes de la CRU se determinan, el nombre de la CRU se forma citando el nombre de la subunidad prioritaria seguido por los nombres de las otras subunidades constituyentes tal como ellas aparecen en la dirección preferida a lo largo de la cadena polimérica.

II-7.3 RECOMENDACIONES

II-7.3.1 El nombre general del polímero

II-7.3.1.1 El uso de poli y los corchetes cuadrados

Un nombre de un polímero para el cual la unidad repetitiva constitucional es conocida, pero con una estructura dimensional (Nota 7j) que puede no ser conocida o que no necesita ser especificada, consiste del prefijo *poli* seguido por los nombres de la unidad repetitiva constitucional (ver Secciones II-7.3.3 – II-7.3.7) cerrada entre corchetes cuadrados, por ejemplo, poli[CRU] (Nota 7k).

II-7.3.1.2 Prefijos numéricos

Si es deseable especificar el número de unidades repetitivas constitucionales, el prefijo numérico apropiado (Nota 7c) puede ser usado en lugar del prefijo *poli*, por ejemplo, deca[CRU].

II-7.3.1.3 Uso del término catena

Un polímero lineal (uni-dimensional) se indica por el prefijo italizado *catena* agregado al nombre del polímero formado de acuerdo a las Secciones II-7.3.1.1 y II-7.3.1.2 (Nota 7l), como en: *catena-poly*[CRU]. El término *catena* también es usado en el Capítulo II-5.

II-7.3.1.4 Especificación de grupos terminales

Los grupos terminales de una molécula polimérica, si se lo desea, pueden ser especificados por prefijos apropiados identificados por las letras griegas α y ω , las cuales se agregan al nombre del polímero formado tal como se indica en las Secciones II-7.3.1.1 ó II-7.3.1.2 y II-7.3.1.3, por ejemplo, α (grupo terminal)- ω -(grupo terminal)-*catena-poly*[CRU]. Los detalles pueden verse en la Sección I-8.3.8 (Nota 7d).

II-7.3.2 Reglas de prioridad para la selección de una CRU preferida

Muchos polímeros inorgánicos y de coordinación regulares de hélices simples y cuasi-simples se pueden representar como múltiplos de una unidad repetitiva convenientemente representada como una serie de subunidades más pequeñas. Las siguientes recomendaciones están vinculadas con varias condiciones de prioridad

Nota 7j : Lineal (cadena), reticulada, ramificada, etc.

Nota 7k : Aunque las reglas para nombrar polímeros orgánicos lineales (Notas 7a y 7b) no suministran medios para describir la estructura dimensional, tal especificación debería permitir que el prefijo *poli* sea un descriptor muy general que no tiene implicancias estructurales más que la presencia de un número de unidades repetitivas constitucionales

Nota 7l : El prefijo *catena* es consistente con las reglas existentes para nombrar compuestos de coordinación con estructuras extendidas (Nota 7d). En mineralogía y geoquímica las cadenas de silicato han sido denotadas por el prefijo *ino* y los prefijos *filo* y *tecto* son usados para hojas (bidimensionales) y estructuras tridimensionales, respectivamente (Nota 7d). El término *catena* no debería confundirse con términos tales como compuestos catenano o catena, usada para describir compuestos anulares orgánicos interlazados.

necesarias para la derivación de una CRU preferencial. Los refinamientos a estas recomendaciones básicas y sus aplicaciones a polímeros específicos se ilustran en las secciones que siguen.

II-7.3.2.1 Elección de la subunidad constituyente principal

- (i) La subunidad constituyente de mayor prioridad es decir, la primera subunidad a ser citada, en la CRU preferida de un polímero inorgánico o de coordinación, debe contener uno o más átomos centrales; los grupos puente entre los átomos centrales en el esqueleto del polímero no pueden ser subunidades principales (ver Nota 7m).
- (ii) Cuando hay dos o más átomos centrales en una CRU de un polímero inorgánico o de coordinación, la subunidad principal es aquella que contiene al átomo central apareciendo en último término en la secuencia general de elementos mostrada en la Tabla II-1 (Nota 7n).
- (iii) Cuando hace falta una posterior elección para escoger una subunidad prioritaria en una CRU de un polímero inorgánico o de coordinación, la preferencia se da según el siguiente orden:
 - (a) un centro de coordinación polinuclear, en orden decreciente del número de átomos centrales, dado que es necesario el uso de centros polinucleares de una subunidad de una CRU (ver Sección II-7.2.3);
 - (b) el átomo dental o el centro de coordinación con el mayor número de átomos donores ligados, excluyendo átomos donores de ligandos de puente en el esqueleto de la cadena polimérica;
 - (c) el átomo central o centro de coordinación cuyo nombre, incluyendo ligandos y los prefijos multiplicativos pero no los ligandos puente en el esqueleto de la cadena polimérica, aparece primero en el alfabeto.

II-7.3.2.2 Elección de la dirección preferencial a lo largo de la cadena polimérica para la cita secuencial de las subunidades constituyentes de la CRU

Luego que se determinan las subunidades principales de la CRU de acuerdo a las consideraciones de precedencia de la Sección II-7.3.2.1, se aplican ordenadamente los siguientes principios generales, en tanto sean pertinentes:

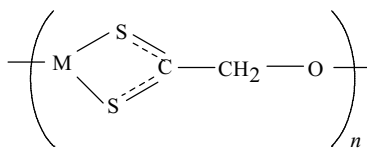
- (i) Cuando es posible tener una CRU de hélice simple o cuasi-simple, la dirección preferida es aquella que da una CRU de hélice sencilla (Nota 7o).

Ejemplos (M = átomo central)

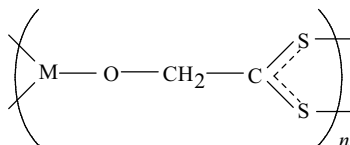
Nota 7m : Esto es consistente con los principios de la nomenclatura de coordinación en la cual el énfasis está siempre colocada en el centro de coordinación. Siempre hay al menos un centro de coordinación en cada polímero inorgánico o de coordinación.

Nota 7n : Nótese que este orden de prioridad no es el mismo con aquel para los heteroátomos dado en las recomendaciones para polímeros orgánicos (Nota 7b).

Nota 7o : Este principio es análogo a aquel que minimiza las valencias libres de las unidades constitutivas repetitivas en la designación de los polímeros orgánicos lineales cuando es necesario para escoger entre una CRU bivalente y otra de mayor orden luego que todos los factores asociados con la determinación de la subunidad de mayor precedencia han sido obedecidos (Nota 7b).



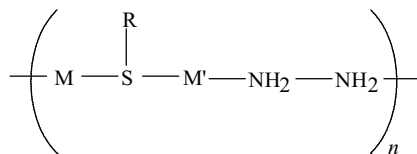
y no



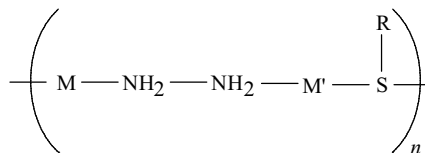
- (ii) *El camino más corto.* La dirección preferida a lo largo de una cadena polimérica para la cita secuencial de las subunidades constituyentes de la CRU es aquella que pasa primero a través del camino más corto desde la subunidad de mayor prioridad a la subunidad de igual prioridad o a la subunidad de la siguiente prioridad. La longitud del camino entre estas subunidades es el número de átomos en la cadena de átomos continua y directa de una unidad a la otra.

Ejemplos (M = átomo central)

1.

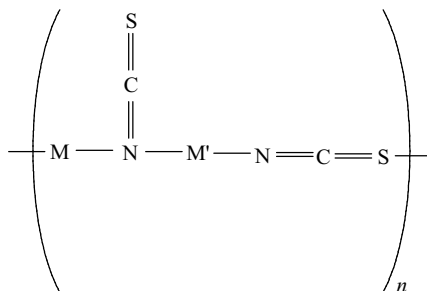


se prefiere a:

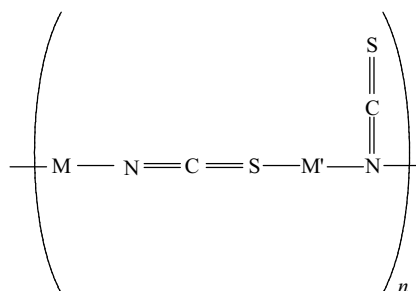


El camino de un átomo a través del ligando tiolato es preferible al camino de dos átomos a través del ligando hidrazina.

2.

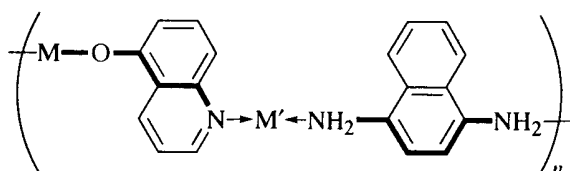


se prefiere a:

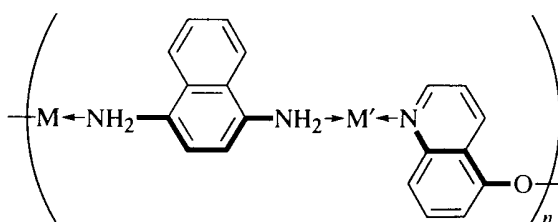


El camino de un átomo a través del átomo de nitrógeno del ligando tiocianato es preferido al camino de tres átomos a través de todos los átomos del ligando tiocianato.

3.



es preferible a



El camino de cinco átomos a través del ligando 5-quinolinolato es preferible al camino de seis átomos a través del ligando 1,4-diaminonaftaleno.

(iii) Cuando hay caminos de igual (la más corta) longitud entre dos subunidades de igual prioridad mayor o entre una subunidad de la mayor prioridad y una subunidad clasificada en el siguiente orden de prioridad, la dirección preferida está determinada por las clases de estructuras y átomos incluidos en el camino y no depende de los nombres actuales para las subunidades en el nombre final de la CRU, a menos que no haya otra elección posible.

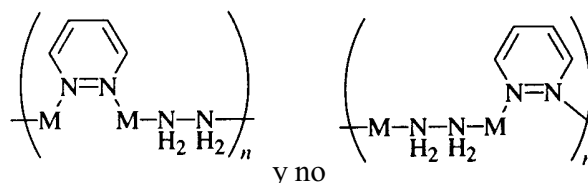
(a) Para la selección del camino preferido, se usan los mismo principios que en las recomendaciones para polímeros orgánicos (Nota 7b), en la cual el orden fundamental de prioridad es:

- (1) heterociclos,
- (2) heteroátomos acíclicos,
- (3) carbociclos, y
- (4) átomos de carbono acíclicos o cadenas.

Las prioridades para estas clases están dadas por las recomendaciones para nomenclatura orgánica que también se siguen en este caso (Notas 7b y Nota 7p).

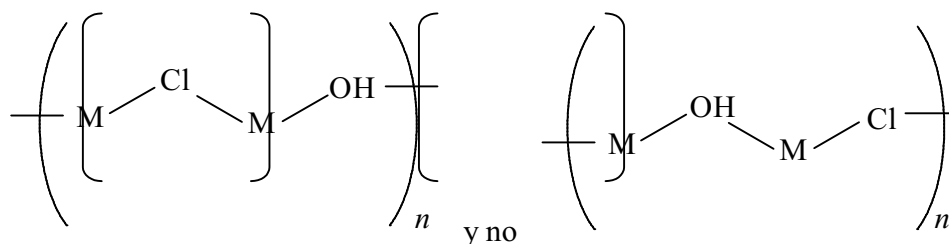
Ejemplos: (M = átomo central)

4.



El heterociclo es preferido a la heterocadena acíclica.

5.



El ligando Cl es preferible al ligando átomo de O.

(b) Los sustituyentes en átomos o grupos en el camino se emplean para determinar prioridad entre otros caminos igualmente idénticos de acuerdo a los principios de la Nota 7b.

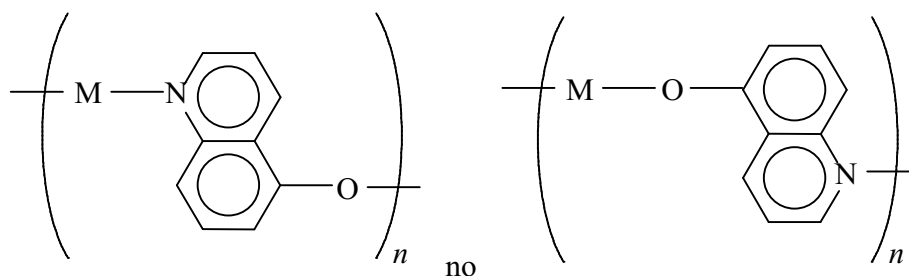
(c) Si hace falta una elección adicional entre caminos idénticos, el preferido conduce al camino más corto, en el sentido de la Sección II-7.3.2.2(ii) para la subunidad prioritaria a la característica estructural preferencial en el camino.

Ejemplos: (M = átomo central)

6. $(-M-N\equiv C-)_n$ no $(-M-C\equiv N-)_n$

El heteroátomo N es preferible al átomo de carbono y por ende es preferido para la cita más próxima de la subunidad prioritaria, M, en la CRU preferida.

7.



El heterociclo es preferido al heteroátomo O y por ello es preferido para la cita más próxima a la subunidad principal, M, en la CRU preferida.

Nota 7p : Es importante notar que el orden de prioridad para heteroátomos en los ligandos prescriptos aquí no es el mismo que para los centros de coordinación [Sección H7.3.2.1(ii)].

- (d) Si hace falta una elección posterior, el camino preferido contiene al ligando cuyo nombre aparece antes en el alfabeto.

II-7.3.3. Polímeros inorgánicos y de coordinación de hélice simple

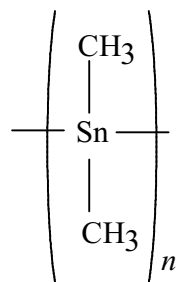
Los polímeros inorgánicos y de coordinación de hélice simple se nombran insertando el nombre de la unidad repetitiva constitucional en el nombre general apropiado del polímero dado en la Sección II-7.3.1.

II-7.3.3.1 CRUs con esqueletos homoatómicos

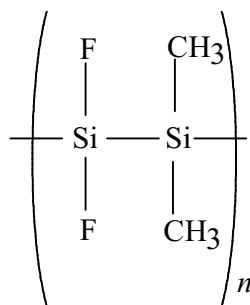
Las CRUs con esqueletos homoatómicos se nombran citando cada átomo central mononuclear, junto con sus grupos laterales, si hay alguno/s, nombrados como ligantes.

Ejemplos: (Nota 7q)

1. $(-S-)_n$
catena-poli [sulfur] (Nota 7d)
- 2.



- 3.



catena-poli [(difluorosilicon)(dimetilsilicon)] (la subunidad con el grupo lateral que aparece primero alfabéticamente es la subunidad prioritaria)

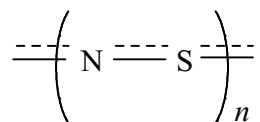
II-7.3.3.2 Unidades repetitivas constitucionales con esqueletos consistentes de un átomo central y un ligando puente

Estos son nombrados citando al átomo central prefijado por sus ligandos no puenteados asociados seguidos por el nombre del ligando puente prefijado por la letra griega μ (Nota 7r).

Nota 7q : De acuerdo a las recomendaciones para nombrar polímeros orgánicos lineales (Notas 7a y 7b), estos polímeros homoatómicos inorgánicos pueden ser nombrados: (1) poli(sulfano diil); (2) poli(dimetilestanileno) o poli(dimetilestanodiilo); (3) poli(1,1-difluoro-2,2-dimetildisilano-1,2-diilo).

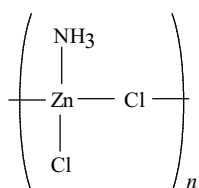
Ejemplos:

1.



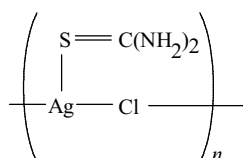
catena-poli [nitrogen- μ -tio] {ver II-7.3.3.2(i) debajo}

2.



catena-poli [(aminoclorozinc)- μ -cloro]

3.

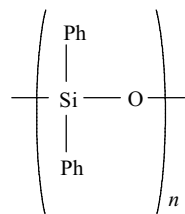


catena-poli [(tiourea-S)plata]- μ -cloro]

- (i) Si hay elección para el átomo central, el elemento que aparece al final de la secuencia de elementos (Tabla II-1) es el átomo central.

Ejemplos:

4.

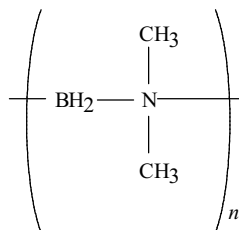


catena-poli [(difenilsilicon)- μ -oxo] (ver Nota 7s)

Nota 7r : Nótese que el ligando puente no está incluido con los otros ligandos unidos al átomo central. Sin embargo, los ligandos puentes para centros de coordinación polinucleares que no son unidades esqueléticas del polímero son agregados en su posición usual en nombre de los centros de coordinación polinuclear (ver Sección II-7.3.5).

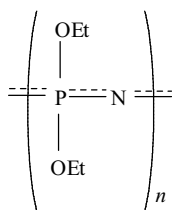
Nota 7s : De acuerdo a las recomendaciones para polímeros orgánicos lineales (Nota 7a y 7b), este polímero debería ser orientado y nombrado pol[oxi(difenilsilino)].

5.



catena-poli [(dihidroboro)- μ -(dimetilamido)]

6.



catena-poli [(dietoxofosforo)- μ -nitrido] (ver Nota 7t).

- (ii) Los símbolos italizados de los elementos indicando los átomos de coordinación o los ligandos puentes en el esqueleto se citan en el orden direccional de cita de la CRU y se separan por dos puntos. Entonces los símbolos de los elementos citados antes de los dos puntos se refieren al átomo central que aparece inmediatamente después del ligando puente en la CRU o en la cadena polimérica.

Ejemplos:

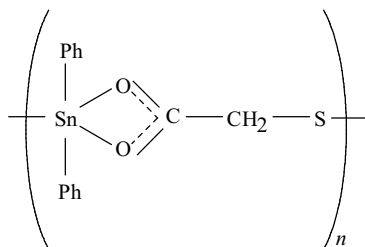
7. (-SnMe₃-S=C=N-)_n

catena-poli [(trimetilestaño)- μ -(tiocianato-S:N)]

8. (-Ag-NC-)_n

catena-poli [plata- μ -(ciano-N:C), no *catena*-poli[plata- μ -(ciano-C:N)] [ver Sección II-7.3.2.2.(iii)(c)]

9.



catena-poli [(difenilestaño)- μ -[mercaptoacetato(2-)-O,O':S] (dirección de cita elegido según Sección II-7.3.2.2)

Nota 7t : De acuerdo a las recomendaciones para los polímeros orgánicos lineales (ver Notas 7a y 7b), este polímero inorgánico debería orientarse y nombrarse po[nitrilo(dietoxifosforanilideno)].

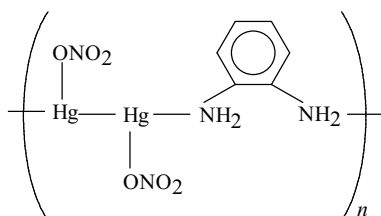
Cuando queda pendiente de elección una dirección de cita de las subunidades constituyentes en la CRU luego de aplicar los principios de la Sección II-7.3.2.2, ella se escoge de manera tal que los símbolos de los elementos en *itálica*, denotando a los átomos de ligando puente, se citan en el orden alfabético ascendente (ver Ejemplo 6 en la Sección II-7.3.3.3).

II-7.3.3.3 CRUs consistentes de más de un átomo central y no más que un ligando puente entre cada átomo central del polímero

Estos se nombran extendiendo los principios de la Sección II-7.3.3.2. El átomo central prioritario se selecciona de acuerdo a la Sección II-7.3.2.1 y la dirección de cita se determina por la Sección II-7.3.2.2.

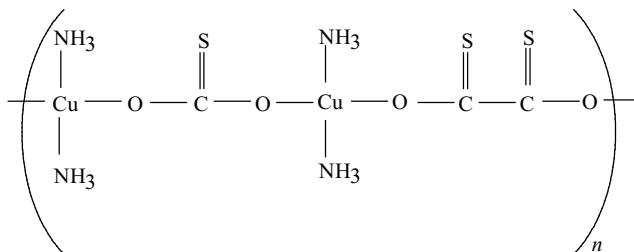
Ejemplos:

1.



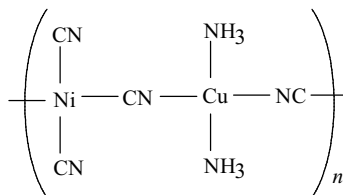
Catena-poli [(nitratomercurio)(nitratomercurio)- μ -(*o*-feniléndiamino-*N:N'*)(*Hg-Hg*)]
(y no: *catena*-poli [(nitratomercurio)- μ -(*o*-feniléndiamino-*N:N'*)nitratomercurio)-(H*g*-*Hg*)); Sección II-7.3.2.2(ii)

2.



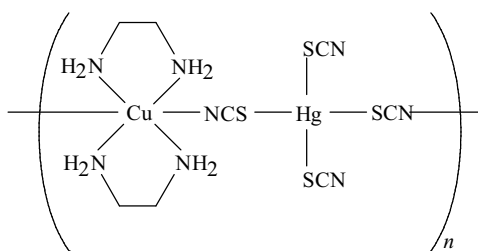
catena-poli [(diaminocobre)- μ -[tiocarbonato(2-)-*O:O*](diaminocobre)- μ -[ditiiooxalato(2-)-*O:O*']
[dirección seleccionada de acuerdo a la Sección II-7.3.2.2(ii)]

3.



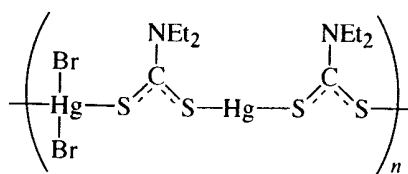
catena-poli [{bis(ciano-*C*)níquel}- μ -(ciano-*C:N*)-(diaminocobre)- μ -(ciano-*N:C*)]
[unidad prioritaria escogida de acuerdo a la Sección II-7.3.2.1(ii)]

4.



catena-poli [{bis(etano-1,2-diamino-*N,N'*)cobre} - μ -(tiocianato-*N:S*)-[bis(tiocianato-*S*)]mercurio]- μ -(tiocianato-*S:N*)]

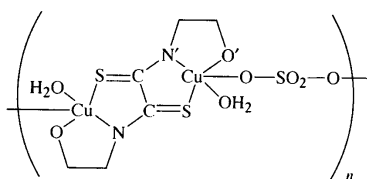
5.



catena-poli [(dibromomercurio)- μ -(dietilditiocarbamato-*S:S'*)-mercurio- μ -(dietil-ditiocarbamato-*S:S'*)]

(subunidad prioritaria elegida de acuerdo a la Sección II-7.3.2.1(iii)(b))

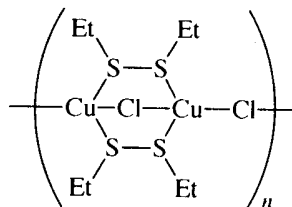
6.



catena-poli [(acuocobre)- μ -[*N,N'*-bis(2-hidroxietyl)ditiocoxamido(2-)-*N,O,S':N',O',S'*](acuocobre)- μ -[sulfato(2-)-*O:O*]] (ver Nota 7u)

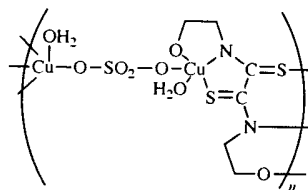
Los ligandos multipuentes entre el mismo par de átomos centrales se citan en orden alfabético, cada uno de ellos precedido por la letra griega μ , y todos ellos encerrados entre corchetes cuadrados para reducir la posibilidad de mala interpretación.

7.



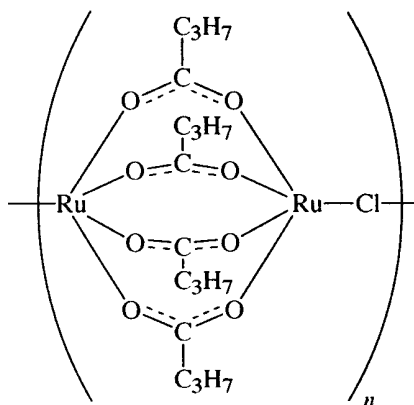
catena-poli [cobre- μ -cloro-bis- μ -(disulfuro de dietilo-*S,S'*)]-cobre- μ -cloro] [dirección de cita escogida según Sección II-7.3.2.2(i)] (Nota 7v)

Nota 7u : Las orientaciones de la CRU que empiezan con cualquiera de los cobres como átomo central y proceden primero a través del ligando sulfato están excluidas por II-7.3.2.2(i). Estas orientaciones producen la estructura polimérica menos preferida del tipo cuasimple hélice que se muestra a continuación.



La elección entre las dos orientaciones restantes se hace de acuerdo al segundo párrafo de la Sección II-7.3.3.2(ii). En la orientación preferida, el orden de la letra localizante para el ligando puente, $N,O,S':N';O',S$, es menor que $N',O',S:N,O,S'$.

8.



catena-poli [[rutenio-tetrakis- μ -(butanoato- O,O')-rutenio($Ru-Ru$)]- μ -cloro]
[dirección de la cita elegida de acuerdo a la Sección II-7.3.2.2(i); (Nota 7w)]

II-7.3.4 Polímeros de coordinación de hélice regular cuasi-simple

Los polímeros de coordinación de hélice regular cuasi-simple se nombran insertando el nombre de la unidad repetitiva constitucional preferida en el nombre apropiado general del polímero tal como viene dado en la Sección II-7.3.1.

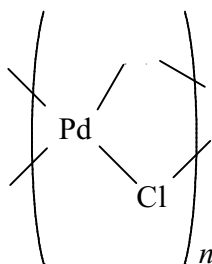
II-7.3.4.1 CRUs con esqueletos consistentes de un átomo central y dos o más ligandos puentes o ligandos quelantes

Las CRUs con esqueletos consistentes en un átomo central y dos o más ligandos puentes, semejantes o diferentes, o ligandos quelantes, se nombran citando el nombre del átomo central, prefijado por los nombres de su ligando(s) asociados no puentes, seguido por los nombres de los ligandos puentes, cada uno prefijado por la letra griega μ . El nombre de los ligandos puentes idénticos, cuando haya más de uno, se indica por el prefijo numérico apropiado; los ligandos distintos se citan en orden alfabético y todos ellos están encerrados entre corchetes adecuados.

Nota 7v : En tales casos puede ser conveniente tratar a los dos átomos de cobre como un complejo binuclear, tal como sigue: *catena*-poli[[μ -cloro-bis- μ -(disulfuro de dietilo- S,S')dicobre]- μ -cloro].

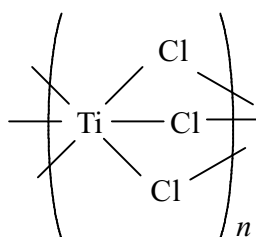
Nota 7w : También es posible tratar a los dos átomos de rutenio como un centro binuclear, dando así el nombre *catena*-poli[[tetrakis- μ -(butanoato- $O:O'$)-dirutenio($Ru-Ru$)- μ -cloro].

1.



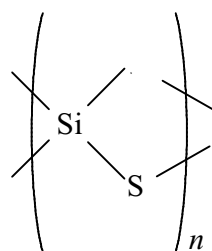
catena-poli [paladio-di- μ -cloro]

2.



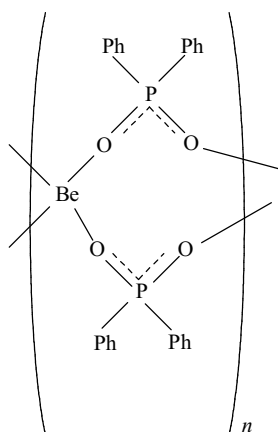
catena-poli [titanio-tri- μ -cloro]

3.



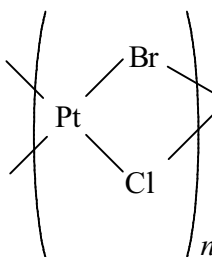
catena-poli [silicio-di- μ -tio]

4.



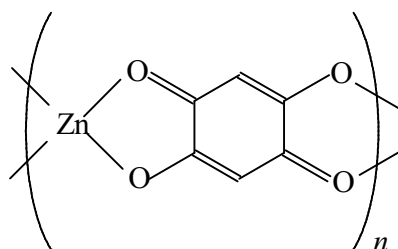
catena-poli [berilio-bis- μ -[difenilfosfinato(1-)-O,O']]

5.



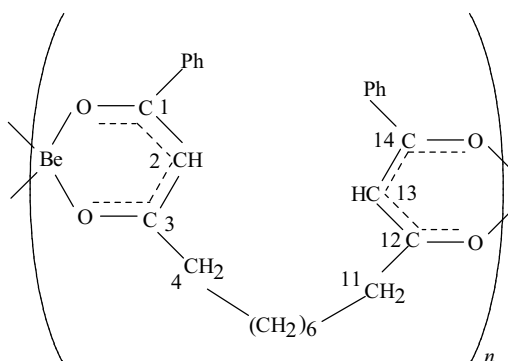
catena-poli [platino(- μ -bromo- μ -cloro)]

6.



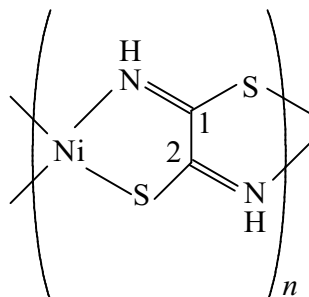
catena-poli [zinc- μ -[2,5-dihidroxi-*p*-benzoquinonato(2-)- $O^1, O^2:O^4, O^5$]]

7.



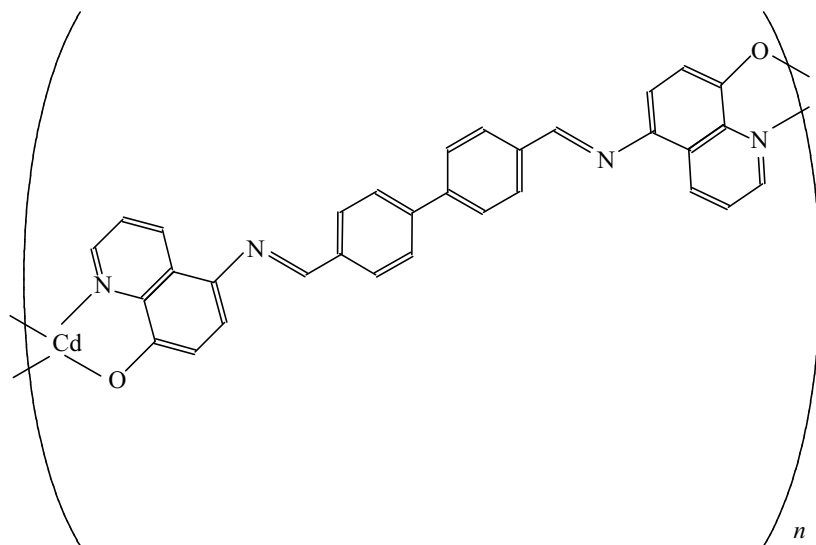
catena-poli [berilio- μ -[1,14-difeniltetradecano-1,3,12,14-tetronato(2-)- $O^1, O^3:O12, O14$]]

8.



catena-poli [níquel- μ -[dithiooximidato(2-)- $N^1, S^2:N^2, S^1$]]

9.



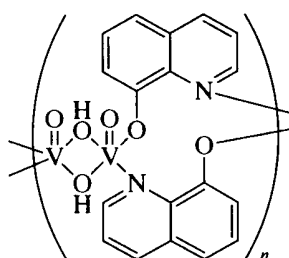
catena-poli [cadmio- μ -[[5,5'-[difenil-4,4'-diilobis(metilidinenitrilo)]di-8-quinolato](2)- $-N^1,O:N^1',O$]

II-7.3.4.2 CRUs que contienen más de un átomo central

Las CRUs que contienen más de un átomo central se nombran por extensión de los principios de la Sección II-7.3.4.1. El átomo central principal se selecciona de acuerdo a la Sección I-7.3.2.1, y el orden de cita está determinado por la Sección II-7.3.2.2.

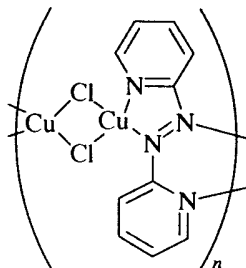
Ejemplos:

1.



catena-poli [(oxovanadio)-di- μ -hidroxo-(oxovanadio)]-[[μ -(quinolín-8-olato- $N:O$)- μ -(quinolín-8-olato- $O:N$)]
[la dirección de citación está determinado por la Sección II-7.2.3.2.2(ii)]

2.



catena-poli [cobre-di- μ -cloro-cobre- μ -[2,2'-(azo-*N*:*N*')dipiridina-*N*:*N*']]
[la dirección de cita está determinada por la Sección II-7.3.2.2(ii)]

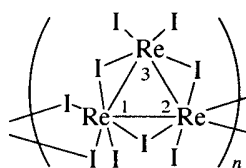
II-7.3.5 Polímeros de coordinación de hélice simple y cuasi-simple con centros de coordinación polinuclear

Los polímeros de coordinación de hélice simple y cuasi-simple con un centro de coordinación polinuclear se denominan prácticamente de la misma forma que los polímeros de coordinación que poseen un solo centro mononuclear. El centro polinuclear es la unidad principal y comienza con la cita de las subunidades en el nombre de la CRU. Ambas posiciones del complejo polinuclear donde el ligando puente está unido se indican por localizantes numéricos, insertados entre el nombre del centro polinuclear y los nombres del ligando puente, y separados por dos puntos; los localizantes anteriores a los dos puntos se refieren al centro polinuclear precedente en la CRU y los localizantes que siguen a los dos puntos se refieren al próximo centro polinuclear en la cadena polimérica.

Ejemplos:

1. $\{-[\text{octaedro-W}_6(\mu\text{-Br}_8)(2,3,4,5\text{-Br}_4)]-(6:1)\text{-}(\text{Br}_4)\text{-}\}_n$
catena-poli [octa- μ -bromo-2,3,4,5-tetrabromo-octaedro-exatungsteno)-6:1- μ -
-tetrabromuro(2-)]

2.



catena-poli [[1,2:1,3:2,3-tri- μ -yodo-1,2,3,3-tetraiodo-triángulo-trirenio(3*Re*-*Re*)]-
-2,2:1,1-di- μ -yodo] (Nota 7x)

II-7.3.6 Polímeros inorgánicos y de coordinación regulares de hélice simple y cuasi-simple con CRUs iónicas

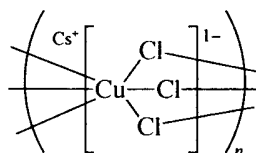
Los polímeros inorgánicos y de coordinación regulares de hélice simple y cuasi-simple con CRUs iónicas se nombran en la misma forma general como se describiera en las Secciones II-7.3.3, II-7.3.4 y II-7.3.5. La carga de la CRU se puede indicar por un número

Nota 7x : Las reglas de numeración para los complejos polinucleares no han sido totalmente definidos. La numeración mostrada aquí es arbitraria y sólo por conveniencia en la definición de la estructura de este polímero en este Capítulo.

de carga citado luego del nombre de la porción iónica de la CRU. Los números de oxidación se pueden emplear para denotar el estado de oxidación del átomo central; si ello se hace así, se adjuntan al nombre del átomo central en la forma usual.

Ejemplos (ver Nota 7y):

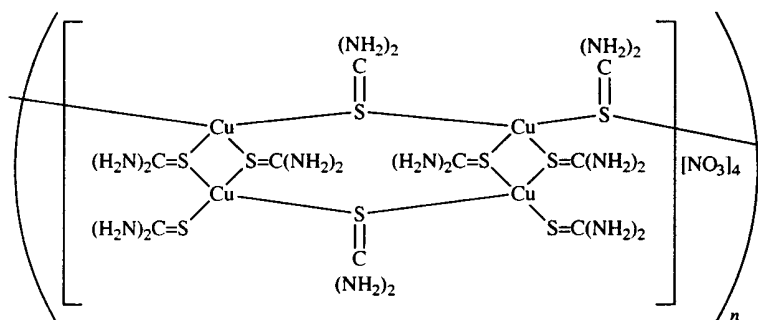
1.



catena-poli [cesio[cuprato-tri- μ -cloro](1-)]
ó

catena-poli [cesio[cuprato(II)-tri- μ -cloro]]

2.



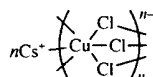
catena-poli [[bis- μ -(tiourea-*S,S*)-2-(tiourea-*S*)dicobre]-1,2:1,2-[bis- μ -(tiourea-*S,S*)][bis- μ -tiourea-*S,S*)-2-(tiourea-*S*)dicobre]-1:1- μ -(tiourea-*S:S*)](4+)tetranitrato]
ó

catena-poli [[bis- μ -(tiourea-*S,S*)-2-(tiourea-*S*)dicobre(I)]-1,2:1,2-[bis- μ -(tiourea-*S,S*)][bis- μ -(tiourea-*S,S*)-2-(tiourea-*S*)dicobre(I)]-1:1- μ -(tiourea-*S:S*)]tetranitrato]

II-7.3.7 Configuración estereoquímica de una CRU

La configuración estereoquímica de una CRU, consistente en un átomo central mononuclear y un ligante puente, se puede designar por prefijos apropiados citados antes del nombre completo apropiado del polímero (Nota 7z).

Nota 7y : Desde un punto de vista inorgánico, puede ser mejor considerar a estos polímeros como sales de iones poliméricos tal como se ilustra a continuación:

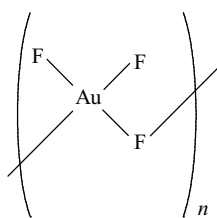


Cesio *catena*-poli[cuprato-tri- μ -cloro](-1) ó cesio *catena*-poli[cuprato(II)-tri- μ -cloro].

Nota 7z : Un formato alternativo en el cual el prefijo estereoquímico insertado entre el prefijo poli y el nombre de la CRU para ambos ejemplos bajo esta recomendación debería ser más consistente con la práctica de la nomenclatura inorgánica, tal como se muestra en los nombres: (i) *catena*-poli[*cis*-[(difluorooro)- μ -fluoro]]; *catena*-poli[*trans*-[dipotasio[(tetrafluoroaluminato)- μ -fluoro](2-))] ó *catena*-poli[*trans*[dipotasio[tetrar-

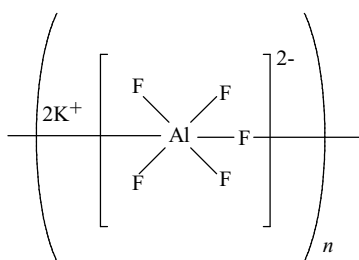
Ejemplos:

1.



cis-catena-poli [(difluorooro)- μ -fluoro]

2.



trans-catena-poli [dipotasio[[tetrafluoroaluminato)- μ -fluoro](2-)]

ó

trans-catena-poli [dipotasio[[tetrafluoroaluminato(III)- μ -fluoro]]

(la práctica de la nomenclatura inorgánica no debería requerir el uso del número de oxidación para el aluminio)

II-7.3.8 Grupos terminales de los polímeros inorgánicos o de coordinación lineales

Los grupos terminales de los polímeros inorgánicos o de coordinación lineales se especifican por prefijos citados en frente del nombre del polímero (ver Sección II-7.3.1.4).

II-7.3.8.1 El uso de los términos α y ω

Los grupos ligados a la primera subunidad constituyente de la CRU preferida es decir, el centro de coordinación principal escrito como la subunidad terminal izquierda en la CRU, se nombran como ligandos y se designan por la letra griega α .

Los grupos terminales unidos a la otra subunidad terminal de la CRU preferencial se nombran como ligandos si están unidos a un átomo central o, si están ligados a un ligando puente, se nombran como un átomo central por el principio usual de la nomenclatura de coordinación y se designan por la letra griega ω .

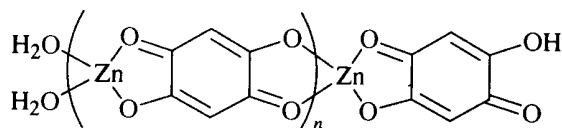
Ejemplos:

1. Cl-(-S-)_n-H

α -cloro- ω -hidruro-*catena*-poli [sulfur]

2.

-fluoroaluminato(III)- μ -fluoro]]. Sin embargo, la recomendación de la Sección II-7.3.4 está de acuerdo con la recomendación para la notación estereoquímica para los polímeros orgánicos [*Pure Appl. Chem.*, **53**, 733 (1981)].



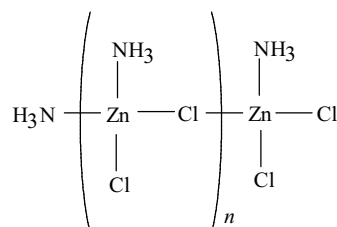
α, α -diacu- ω -[[2,5-dihidroxi-*p*-benzoquinonato(1-)- O^1, O^2]cinc]-catena-poli [cinc- μ -2,5-dihidroxi-*p*-benzoquinonato(2-)- $O^1, O^2:O^4, O^5$]]

II-7.3.8.2 Elección de los grupos terminales

Cuando hacen falta elegir los ligandos para ser citados como un grupo terminal o incluirlos en la CRU, el ligando escogido como grupo terminal α es aquel cuyo nombre aparece primero en el alfabeto.

Ejemplo:

1.



α -amino- ω -(aminodiclorocinc)-catena-poli [(aminoclorocinc)- μ -cloro]

II-7.3.8.3 Grupos iónicos terminales

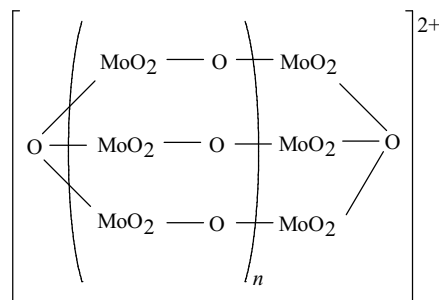
Los grupos terminales que se pueden considerar como iónicos se nombran por medio de los principios de la nomenclatura de coordinación. La carga se indica por un número de carga citado al final del nombre completo del polímero.

Ejemplos:

1. $[O(-MoO_2-O)^n-MoO_3]^{2-}$

$[\alpha$ -oxo- ω -(trioxomolibdato)-catena-poli [(dioxomolibdeno)- μ -oxo]](2-)

2.



α - μ_3 -oxo- ω - $[\mu_3$ -oxo-tris(dioxomolibdeno)]tris[catena-poli-[(dioxomolibdeno)- μ -oxo]](2+)
(Nota 7aa)

Nota 7aa : Este es un polímero regular de hélicesimple consistente en tres cadenas unidas por un grupo terminal oxo.

Índice Alfabético

Anderson, 15, 16
arsénico, 17, 100, 111
átomos anulares, 81, 82
azano, 61
bi-intercalación, 112, 114
cadenas ramificadas, 73, 86, 107
Cahn, Ingold y Prelog, 46
cajas, 107
camino más corto, 122, 126, 128
catena, 71, 95, 97, 103, 120, 124, 134, 139
centros de coordinación polinucleares, 120, 123, 130
clorinas, 48, 54
clorofilas, 55
compuestos de coordinación, 7, 16, 96, 106, 124
compuestos de intercalación, 108, 109, 110, 111, 112, 114
compuestos de valencia mixta, 12
compuestos específicamente etiquetados, 33, 35
compuestos ternarios, 112, 113
corchetes cuadrados, 33, 34, 35, 36, 38, 92, 94, 97, 124, 133
Dawson, 25
def, 39
denominación, 25, 71, 86, 87, 120, 123
descriptores nodales, 94, 101
diazano, 66
diazeno, 68
donor, 64, 105, 111
epitaxis, 114
esqueletos, 119, 129, 134
estado de oxidación, 12, 45, 63, 74, 139
estereoquímica, 46, 51, 65, 139, 140
estructuras defectuosas, 23
fósforo, 17, 74, 98, 100, 101
Gard, 115
gen, 37, 38
grafeno, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116
grafito, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116
grafos, 86, 92, 93, 94
grupos terminales, 119, 120, 124, 140, 141
hélice, 118, 119, 120, 122, 123, 125, 129, 133, 134, 138, 141
heteropolianiones, 11, 16
hidrazina, 61, 66, 68, 126
hidrógeno, 30, 44, 61, 66, 71, 72, 75, 81, 87, 88, 96, 101, 111
hidruro, 62, 63
hidruros de nitrógeno, 61, 62, 64, 65, 68
hierro, 48
homopolianiones, 11
índice de configuración, 46
iones catenato, 79
iones catenio, 78
isómeros, 7, 12, 16, 17, 18, 21, 22, 24, 26, 27
kappa, 45, 64, 65
Keggin, 16, 17, 18, 19, 23, 24, 25

ligandos, 6, 7, 8, 11, 13, 15, 16, 44, 45, 46, 48, 61, 63, 64, 65, 68, 71, 74, 75, 80, 81, 82, 83, 87, 88, 92, 95, 96, 98, 102, 103, 104, 105, 120, 122, 123, 125, 128, 129, 130, 131, 133, 134, 140, 141

ligandos puente, 123, 125, 130, 131, 134

Lindqvist, 11, 14, 15, 20

localizantes, 7, 8, 11, 22, 26, 27, 30, 36, 38, 39, 40, 41, 45, 71, 75, 88, 90, 93, 94, 97, 98, 104, 138

modificación isotópica, 35, 41, 42

molibdeno, 14, 15, 17, 22

nombres sistemáticos, 61, 62, 64

nombres triviales, 43, 48, 52, 61, 119

nomenclatura de coordinación, 8, 12, 75, 81, 120, 123, 125, 140, 141

nomenclatura nodal, 86, 87, 100

numeración de átomos, 88

orientación, 46, 120, 134

plano de simetría de referencia, 9, 21

plano esquelético terminal preferido, 8, 9

poli, 22, 119, 120, 124, 129, 130, 131, 134, 139

polianiones, 7, 11, 15, 16, 17, 23, 25, 27

poliedros, 8

porfirinas, 43, 44, 48

porfirinógeno, 58

racimos, 39, 103

retículo cristalino, 38, 115

secuencia de elementos, 72, 84, 130

secuencia de prioridades, 98

subunidades constituyentes, 118, 120, 122, 124, 125, 126, 132

tetrapirrol, 44, 45, 46, 48

tetrapirroles, 43, 44, 48

transferencia de carga, 12, 108, 109, 111, 116

tungsteno, 12, 13, 14, 15, 17, 21, 23, 25

unf, 38

unidades repetitivas constitucionales, 115, 118, 121, 124

vanadio, 13, 21, 22