



Guia breu de la nomenclatura de química inorgànica

R. M. Hartshorn (Nova Zelanda),* K.-H. Hellwich (Alemanya), A. Yerin (Rússia), T. Damhus (Dinamarca), A. T. Hutton (República de Sud-àfrica). *A/e: inorganic.nomenclature@iupac.org. Organisme patrocinador: Divisió de Nomenclatura Química i Representació d'Estructures de la IUPAC.

PREÀMBUL

L'adopció universal d'una nomenclatura química consensuada és una eina clau per a la comunicació en ciències químiques, per a la cerca en bases de dades per ordinador i, també, per a finalitats reguladores, com ara les relacionades amb la seguretat i la salut o amb l'activitat comercial. La **Unió Internacional de Química Pura i Aplicada (IUPAC)** proporciona recomanacions sobre la naturalesa i l'ús de la nomenclatura química.¹ Els conceptes bàsics d'aquesta nomenclatura es presenten aquí i en altres documents complementaris sobre els sistemes de nomenclatura de la **química orgànica**² i dels **polímers**,³ amb enllaços als documents originals. Un resum general de la nomenclatura química es pot trobar a *Principles of chemical nomenclature*.⁴ Es troben més detalls en l'obra *Nomenclature of inorganic chemistry*, coneguda col·loquialment com el llibre vermell,⁵ i en les publicacions relacionades amb els **compostos orgànics** (el llibre blau)⁶ i els **polímers** (el llibre porpra).⁷ Cal tenir en compte que molts compostos poden tenir noms no sistemàtics o semisistemàtics (alguns dels quals no són acceptats per la IUPAC per diversos motius com, per exemple, perquè són ambigus) i que les regles de la IUPAC permeten, en molts casos, donar més d'un nom sistemàtic. La IUPAC està treballant en la identificació de noms únics, els quals han de ser els preferents a l'hora de fer-ne la regulació normativa (*Preferred IUPAC names* o PIN). NOTA: En aquest document, el símbol = s'empra per a dividir els noms que són massa llargs per al format de la columna de text o d'una taula, llevat que el nom ja contingui un guionet.

Les fronteres entre compostos «orgànics» i «inorgànics» són difuses. Els tipus de nomenclatura descrits en aquest document són aplicables als compostos, les molècules i els ions que no contenen carboni, i, també, a moltes estructures que en contenen (secció 2), en particular a les que inclouen elements dels grups 1-12. La majoria dels compostos de bor es tracten mitjançant una nomenclatura específica.⁸

1 NOMS ESTEQUIOMÈTRICS O DE COMPOSICIÓ

Un nom **estequiomètric** o **de composició** només proporciona informació sobre la composició d'un ió, molècula o compost i pot estar relacionat amb la fórmula empírica o amb la fórmula molecular d'aquesta entitat. No proporciona cap informació estructural.

El nom de les **entitats homooatòmiques**, que només contenen un element, es forma (taula 1) combinant el nom de l'element amb el **prefix multiplicador** adequat (taula 2). Els ions s'anomenen afegint-hi els nombres de càrrega entre parèntesis, per exemple, (1+), (3+), (2-) i el nom (de la majoria) dels anions homooatòmics es fa acabar en «ur» (sovint anteposant-hi una «n» etimològica: «(n)ur», on calgui) en lloc de les terminacions pròpies dels noms dels elements: «i», «e», «en», «ó», «ogen», «or» o «om».⁹ Una excepció és «òxid» per a l'oxigen. Per a uns quants elements (p. ex., Fe, Ag, Au) s'utilitza l'arrel llatina avantposada a la terminació «ur» (cf. secció 2.3).⁹ Alguns ions poden tenir noms tradicionals acceptables (que s'usen sense nombres de càrrega).

Per a citar la versió original en anglès, feu servir, si us plau: IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **87** (2015), p. 1039-1049.

Per a citar aquesta guia en català, feu servir, si us plau: IUPAC, *Guia breu de la nomenclatura de química inorgànica*, 2022, <<https://doi.org/10.2436/10.2003.03.1>>. Es permet la publicació d'aquest document per qualsevol mitjà, sempre que es faci íntegrament i sense canvis. Copyright © IUPAC i De Gruyter, 2015. I, de l'edició en català, Societat Catalana de Química (IEC), 2022. La traducció ha estat a cura de Joaquim Sales.

1. Disponible gratuïtament a: a) <https://www.degruyter.com/journal/key/pac/html>; b) <https://iupac.qmul.ac.uk/>.
2. K.-H. HELLWICH, R. M. HARTSHORN, A. YERIN, T. DAMHUS, A. T. HUTTON, «Brief guide to the nomenclature of organic chemistry», *Pure Appl. Chem.*, **92**, 3 (2020), p. 527-539.
3. R. C. HIORNS, R. J. BOUCHER, R. DUHLEV, K.-H. HELLWICH, P. HODGE, A. D. JENKINS, R. G. JONES, J. KAHOVEC, G. MOAD, C. K. OBER, D. W. SMITH, R. F. T. STEPTO, J.-P. VAIRON, J. VOHLÍDAL, «A brief guide to polymer nomenclature», *Pure Appl. Chem.*, **84**, 10 (2012), p. 2167-2169.
4. G. J. LEIGH (ed.), *Principles of chemical nomenclature: A guide to IUPAC recommendations: 2011 Edition*, Cambridge (UK), RSC Publishing, 2011, ISBN 978-1-84973-007-5.
5. N. G. CONNELLY, T. DAMHUS, R. M. HARTSHORN i A. T. HUTTON (ed.), *Nomenclature of inorganic chemistry: IUPAC recommendations 2005*, Cambridge (UK), RSC Publishing, 2005, ISBN 0-85404-438-8. Hi ha una versió oficial en català de les recomanacions del 1990, no actualitzada.
6. H. A. FAVRE i W. H. POWELL (ed.), *Nomenclature of organic chemistry: IUPAC recommendations and preferred names 2013*, Cambridge (UK), Royal Society of Chemistry, 2014, ISBN 978-0-85404-182-4; fe d'errates: <<https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html>>. Hi ha una versió oficial en català de les recomanacions del 1993, no actualitzada.
7. R. G. JONES, J. KAHOVEC, R. STEPTO, E. S. WILKS, M. HESS, T. KITAYAMA i W. V. METANOMSKI (ed.), *Compendium of polymer terminology and nomenclature: IUPAC recommendations 2008*, Cambridge (UK), RSC Publishing, 2008, ISBN 978-0-85404-491-7.
8. Capítol 10 de la referència de la nota 4.
9. Taula IX de la referència de la nota 5.

Taula 1. Exemples d'entitats homooatòmiques

Fórmula	Nom	Fórmula	Nom
O ₂	dioxigen	Cl ⁻	clorur(1-) o clorur
S ₈	octasofre	I ₃ ⁻	triiodur(1-)
Na ⁺	sodi(1+)	O ₂ ²⁻	diòxid(2-) o peròxid
Fe ³⁺	ferro(3+)	N ₃ ⁻	trinitrur(1-) o azidur

Taula 2. Prefixos multiplicadors per a entitats simples i complicades

Nre.	Simple	Complicada	Nre.	Simple	Complicada
2	di	bis	8	octa	octaquis
3	tri	tris	9	nona	nonaquis
4	tetra	tetraquis	10	deca	decaquis
5	penta	pentaquis	11	undeca	undecaquis
6	hexa	hexaquis	12	dodeca	dodecaquis
7	hepta	heptaquis	20	icosa	icosaquis

Els **compostos binaris** (els que contenen àtoms de dos elements diferents) s'anomenen estequiomètricament combinant els noms dels elements. Per convenció, l'element que es troba primer seguint la fletxa de la seqüència dels elements (figura 1) es tracta com un anió. Per tant, el nom d'aquest element, formalment «electronegatiu», rep una terminació «ur» i se situa primer en el nom del compost, seguit de la preposició «de» i del nom de l'element formalment «electropositiu» (taula 3).

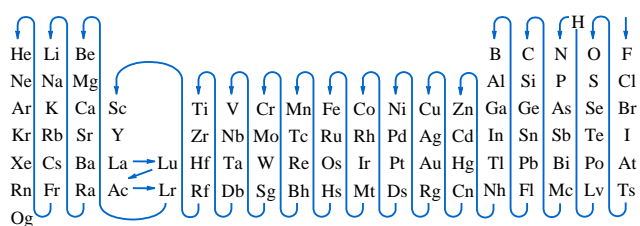


Figura 1. Seqüència dels elements

Taula 3. Exemples de compostos binaris

Fórmula	Nom	Fórmula	Nom
GaAs	arsenur de gaHl	FeCl ₂	diclorur de ferro o clorur de ferro(II)
CO ₂	diòxid de carboni	FeCl ₃	triclorur de ferro o clorur de ferro(III)
CaF ₂	difluorur de calci o fluorur de calci	H ₂ O ₂	diòxid de dihidrogen o peròxid d'hidrogen

Novament, els prefixos multiplicadors (taula 2) s'apliquen quan calgui, i s'accepta l'ús d'alguns noms alternatius.¹⁰ En alguns casos l'estequiometria es pot expressar mitjançant els nombres d'oxidació, però sovint s'ometen quan no hi ha cap dubte, com en el fluorur de calci.

En general, les **entitats heteropoliatòmiques** es poden anomenar de manera similar mitjançant la nomenclatura de composició, però sovint s'utilitza una nomenclatura de substitució¹¹ o d'addició (secció 2). En aquest darrer cas, també es dona informació sobre la manera com els àtoms estan connectats. Per exemple, POCl₃ (o PCl₃O), amb nom de composició: «triclorur òxid de fòsfor») té el nom d'addició indicat a la taula 10.

Determinats ions tenen noms tradicionals curts, que s'utilitzen habitualment i encara són acceptables (p. ex., amoni, NH₄⁺; hidròxid, OH⁻; nítrid, NO₂⁻; fosfat, PO₄³⁻; difosfat, P₂O₇⁴⁻).

Els compostos inorgànics poden ser, en general, combinacions de cations, anions i entitats neutres. Per convenció, el nom d'un compost està format pels noms de les entitats que el componen: els anions van primer, seguits de la preposició «de» i dels noms dels cations i, al final, els noms dels components neutres (vegeu els exemples de la taula 4).

Taula 4. Ús dels prefixos multiplicadors en els noms de composició

Fórmula	Nom
Ca ₃ (PO ₄) ₂	bis(fosfat) de tricalci
Ca ₂ P ₂ O ₇	difosfat de dicalci
BaO ₂	diòxid(2-) de bari(2+) o peròxid de bari
MgSO ₄ ·7H ₂ O	sulfat de magnesi heptahidrat
CdSO ₄ ·6NH ₃	sulfat de cadmi—amoníac (1/6)
AlK(SO ₄) ₂ ·12H ₂ O	bis(sulfat) d'alumini i potassi—aigua (1/12) o bis(sulfat) d'alumini i potassi dodecahidrat
Al ₂ (SO ₄) ₃ ·K ₂ SO ₄ ·24H ₂ O	tris(sulfat) de dialumini—sulfat de dipotassi—aigua (1/1/24)

10. Taula P10 de la referència de la nota 4.
11. Capítol IR-6 de la referència de la nota 5.



Per tal de reflectir la composició d'un compost, cal especificar el nombre de cada entitat present. Amb aquest propòsit, s'afegeixen prefixos multiplicadors (taula 2) al nom de cada entitat. Els prefixos que s'empren són «di», «tri», «tetra», etc., amb els noms de les entitats simples, o «bis()», «tris()», «tetraquis()», etc., amb els noms d'aquelles entitats que ja contenen, elles mateixes, prefixos multiplicadors o locatius. S'ha d'anar amb compte, també, en les situacions en què es pot interpretar malament l'ús d'un prefix multiplicador simple; per exemple, s'ha d'utilitzar tris(iodur) per a $3I^-$ en lloc de triiodur (que s'utilitza per a I_3^-), i bis(fosfat) en comptes de difosfat (que s'emptra per a $P_2O_7^{4-}$). A la taula 4 se'n donen uns quants exemples. No hi ha elisió de vocals (p. ex., tetraaqua, pentaòxid), excepte en el cas especial de monòxid.

Els noms dels components neutres se separen per guions llargs (—) sense espais. Els compostos inorgànics poden ser ells mateixos components en **compostos d'addició** (formals) (vegeu els darrers quatre exemples de la taula 4). Les proporcions dels diferents components s'indiquen, en general, mitjançant un descriptor estequiomètric entre parèntesis després del nom (vegeu els tres darrers exemples de la taula 4). En el cas especial dels hidrats, es poden utilitzar prefixos multiplicadors amb el terme «hidrat».

2 COMPLEXOS I NOMENCLATURA D'ADDICIÓ

2.1 Enfocament general

La nomenclatura d'addició es va desenvolupar per a descriure les estructures dels compostos de coordinació o complexos, però aquest mètode també es pot aplicar fàcilment a altres entitats moleculars. Els complexos mononuclears consten d'un àtom central, sovint un ió metàl·lic, que s'uneix a molècules petites o ions que l'envolten i s'anomenen lligands. Els noms dels complexos es construeixen (taula 5) col·locant els noms dels lligands *abans* que el de l'àtom central, utilitzant els prefixos multiplicadors adequats. Les fórmules es construeixen afegint els símbols o abreviatures dels lligands *després* del símbol de l'àtom central (secció 2.7).

Taula 5. Generació de noms per a complexos: lligands simples

Estructura que s'ha d'anomenar		
Àtom(s) central(s)	cobalt(III)	2 × reni
Identificació i nom dels lligands	amoníac → ammina aigua → aqua	clorur → clorur
Construcció del nom	clorur de pentaamminaaqua=cobalt(III)	bis(tetracloruro=renat)(Re—Re)(2-) de cesi

2.2 Àtom(s) central(s) i lligands

El primer pas consisteix a identificar el(s) àtom(s) central(s) i, per tant, també els lligands. Per convenció, els electrons implicats en l'enllaç entre l'àtom central i un lligand es considera que pertanyen al lligand (i això en determinarà el nom).

Cada lligand s'anomena com una entitat separada mitjançant la nomenclatura adequada,⁴ generalment la nomenclatura substitutiva per als lligands orgànics^{2,4,6} i la nomenclatura additiva per als lligands inorgànics. Un petit nombre de molècules i d'ions comuns reben **noms especials** quan formen part de complexos. Per exemple, un lligand aigua es representa amb el terme «aqua». Un lligand amoníac és representat per «ammina», mentre que el monòxid de carboni unit a l'àtom central a través de l'àtom de carboni es representa amb el terme «carbonil» i el monòxid de nitrogen unit per mitjà del nitrogen es representa per «nitrosil». Els noms dels **ligands aniónics** que acaben en «ur», «at» o «ít» es modifiquen en el nom d'addició i acaben en «uro», «ato» o «íto», respectivament; l'òxid, l'hidròxid i el peròxid com a lligands passen a anomenar-se: «òxido», «hidroxido» i «peroxido». Convencionalment, un àtom d'hidrogen coordinat es considera sempre aniónic i es representa amb el terme «hidruro» en el nom; en canvi, el dihidrogen coordinat es tracta, generalment, com una entitat neutra donadora de dos electrons.

2.3 Construcció dels noms d'addició

Un cop identificats i anomenats els lligands, es pot construir el nom del complex. Això es fa enumerant els noms dels lligands per ordre alfabètic abans del nom del(s) àtom(s) central(s), *sense* tenir en compte la càrrega del lligand.

Si hi ha més d'un lligand d'un tipus concret enllaçat de la mateixa manera a l'àtom central, el nombre d'aquests lligands idèntics s'indica mitjançant el prefix multiplicador adequat (taula 2), sense canviar l'ordre alfabètic dels lligands establert prèviament. L'ordre de col·locació dels signes d'inserció en el nom del complex, quan en cal més d'un, és: (), [], { }, ({ }), etc. Els **enllaços metall-metall** s'indiquen col·locant els símbols de l'àtom central entre parèntesis, escrits en cursiva i connectats mitjançant un guió llarg després del nom del complex (sense espais). El **nombre de càrrega** del complex o el **nombre d'oxidació** de l'àtom central s'afegeixen al final del nom del complex. En els **complexos aniónics** que s'anomenen amb la nomenclatura d'addició, el nom de l'àtom central es fa acabar en «at», de la mateixa manera que s'emptra la terminació «ur» en els anions homoatòmics (secció 1). En

alguns casos, per tradició, s'utilitza l'arrel llatina per a designar aquests complexos aniónics, tals com ferrat (per al ferro), cuprat (per al coure), argentat (per a la plata), estannat (per a l'estany), aurat (per a l'or) i plumbat (per al plom).¹² Finalment, s'empren les regles de la nomenclatura de composició (secció 1) per a combinar els noms d'addició dels compostos de coordinació neutres o iònics amb els noms de qualsevol altra entitat que formi part del compost.

2.4 Especificació de la connectivitat

Alguns lligands es poden unir a un àtom central per mitjà d'àtoms diferents segons les circumstàncies. Per a poder precisar quins àtoms del lligand (àtoms coordinadors) estan units en un complex, s'afegeixen **termes κ** al nom del lligand. El terme κ està format per la lletra grega kappa seguida del símbol de l'element coordinador en cursiva. Per als lligands més complicats, el terme κ es col·loca, sovint, dins el nom del lligand, a continuació del grup al qual el terme κ fa referència. Si hi ha més d'un enllaç idèntic a un àtom central, es pot indicar mitjançant l'addició del número adequat com a superíndex entre els símbols κ i el de l'element (vegeu la taula 6). Aquestes possibilitats es tracten amb més detall al llibre vermell.¹³ Si els àtoms coordinadors d'un lligand són contigus (és a dir, estan enllaçats directament), aleshores s'utilitza un **terme η**, per exemple, en molts compostos organometàl·lics (secció 2.6) i en el complex que conté peròxid de la taula 6.

Per als lligands on és possible més d'un mode de coordinació es requereix un terme κ. Alguns casos típics són el tiocianat, que es pot unir mitjançant l'àtom de sofre (tiocianato-κS) o l'àtom de nitrogen (tiocianato-κN), i el nitrit, que es pot unir per l'àtom de nitrogen (M—NO₂, nitrito-κN) o per un àtom d'oxigen (M—ONO, nitrito-κO). Per exemple, els noms pentaammina(nitrito-κN)cobalt(2+) i pentaammina(nitrito-κO)cobalt(2+) s'utilitzen per a descriure cadascun dels dos isòmers del complex catiónic. A la taula 6 es mostren més exemples de construcció de noms mitjançant termes κ per a especificar la connectivitat dels lligands. Si en un complex hi ha més d'un àtom central, també es pot utilitzar un terme κ per a indicar a quin àtom central està enllaçat el lligand (secció 2.5).

Taula 6. Generació de noms per a complexos: lligands complicats

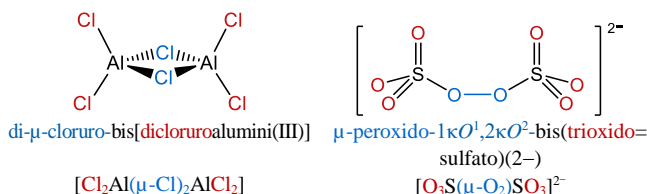
Estructura que s'ha d'anomenar		
Àtom central	cobalt(III) → cobaltat(III)	platí(II)
Identificació i nom dels lligands	2,2',2'',2'''-(etan-1,2-diil=dinitrilo)tetraacetat → 2,2',2'',2'''-(etan-1,2-diil=dinitrilo)tetraacetato	clorur → cloruro trifenilfosfà
Especificació dels àtoms coordinadors	2,2',2'',2'''-(etan-1,2-diil=dinitrilo-κ ² N)tetraacetato-κ ⁴ O	no cal per al cloruro trifenilfosfà-κP
Construcció del nom	[2,2',2'',2'''-(etan-1,2-diil=dinitrilo-κ ² N)tetraacetato-κ ⁴ O]=cobaltat(III) de bari	diclorurobis(trifenilfosfà-κP)=platí(II)
Estructura que s'ha d'anomenar		
Àtom central	cobalt(III)	molibdè(III)
Identificació i nom dels lligands	etan-1,2-diamina peròxid → peroxido	clorur → cloruro 1,4,8,12-tetratiaciclo=pentadecà
Especificació dels àtoms coordinadors	etan-1,2-diamine-κ ² N η ² -peroxido	no cal per al clorur 1,4,8,12-tetratiaciclo=pentadecà-κ ² S ¹ ,S ⁴ ,S ⁸
Construcció del nom	bis(etan-1,2-diamina-κ ² N)=(η ² -peroxido)cobalt(III)	tricloruro(1,4,8,12-tetratiaciclo=pentadecà-κ ² S ¹ ,S ⁴ ,S ⁸)molibdè(III)

2.5 Lligands pont

Els lligands pont són aquells que estan units a més d'un àtom central. Aquest fet s'indica en el nom del complex per l'addició del prefix «μ» (lletra grega mi, anomenada mu en l'àmbit científic); el prefix i el nom del lligand pont se separen l'un de l'altre i de la resta del nom per mitjà de guionets. Amb això n'hi ha prou si el lligand és monoatòmic, però si el lligand és més complicat, pot ser necessari especificar quin àtom coordinador del lligand està unit a quin àtom central. Aquest és el cas en què els àtoms coordinadors són de tipus diferent, i es poden utilitzar termes κ amb aquest propòsit.

12. Taula X de la referència de la nota 5.

13. Secció IR-9.2.4 de la referència de la nota 5.



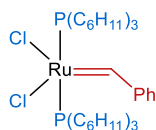
2.6 Compostos organometàllics

Els compostos organometàllics contenen almenys un enllaç entre un àtom metàl·lic i un àtom de carboni. S'anomenen com els compostos de coordinació, mitjançant el sistema de nomenclatura additiva (vegeu més amunt).

El nom d'un lligand orgànic **que s'uneix per mitjà d'un àtom de carboni** es pot deduir tractant el lligand com un anió o com un grup substituïent neutre. Així, el compost $[\text{Ti}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_3\text{Cl}_3]$ es pot anomenar **tricloruro(propan-1-uro)títani** o **tricloruro(propil)títani**. De la mateixa manera, per al lligand $-\text{CH}_3$ es pot utilitzar «metanuro» o «metil».

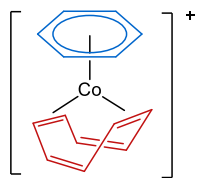
Quan un lligand orgànic forma **dos o tres enllaços simples metall-carboni** (a un o més centres metàl·lics), el lligand es pot tractar com un anió di- o trivalent, amb les terminacions «diuro» o «triuro», afegint una «n» etimològica al nom de l'hidrocarbur progenitor. Encara se solen trobar noms derivats de considerar aquests lligands com a grups substituïents amb els sufixos «diil» i «triil». Així, el lligand bidentat $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ s'anomenaria propan-1,3-diuro (o propan-1,3-diil) si actua com a quelant a un centre metàl·lic, i μ -propan-1,3-diuro (o μ -propan-1,3-diil) si fa de pont entre dos àtoms metàl·lics.

En els compostos organometàllics que contenen un **enllaç metall-carboni múltiple**, el nom del lligand deriva del nom del seu hidrur progenitor acabat en «ilidè» per a un doble enllaç metall-carboni, i amb «ilidí» per a un triple enllaç. Aquests sufixos reemplaçen la terminació «à» de l'hidrur progenitor o, més generalment, s'afegeixen al nom d'aquest hidrur amb la inserció d'un localitzador i l'addició de la «n» etimològica. Per tant, l'entitat $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{C}$ com a lligand s'anomena propilidè i l'entitat $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{C}$ s'anomena propan-2-ilidè. La nomenclatura «diuro»/«triuro», descrita abans, també es pot utilitzar en aquest cas. Els termes «carbè» i «carbí» no s'empren en la nomenclatura sistemàtica.

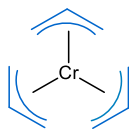


dicloruro(fenilmetilidè)bis(triciclohexilfosfà- κ P)ruteni,
dicloruro(fenilmetandiuro)bis(triciclohexilfosfà- κ P)ruteni
o (benzilidè)diclorurobis(triciclohexilfosfà- κ P)ruteni

La naturalesa particular de l'enllaç dels hidrocarburs insaturats amb els metalls de manera lateral, mitjançant els electrons π requereix la **convenció eta (η)**. En aquesta nomenclatura «hapto», el nombre d'àtoms *contigus* del lligand coordinat amb el metall (l'hapticitat del lligand) s'indica mitjançant un superíndex a la dreta del símbol eta, per exemple, η^3 («eta tres» o «tri-hapto»). El terme η s'afegeix com a prefix al nom del lligand o a la porció del nom del lligand més adequada per a indicar la connectivitat, amb localitzadors si cal.



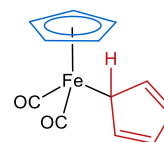
(η^6 -benzè)(1,2,5,6- η -cicloocta-1,3,5,7-tetraè)cobalt(1+)



tris(η^3 -prop-2-en-1-uro)crom,
tris(η^3 -prop-2-en-1-il)crom
o tris(η^3 -alil)crom

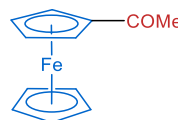
Al llibre vermell es pot trobar una llista de **ligands insaturats**, neutres i aniònics, **que s'uneixen amb enllaços π** .¹⁴

Cal tenir en compte que el lligand omnipresent $\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5$, estrictament η^5 -ciclopenta-2,4-dien-1-uro, es pot anomenar, també, η^5 -ciclopentadienuro o η^5 -ciclopentadienil. Quan aquest lligand es coordina a través d'un sol àtom de carboni mitjançant un enllaç σ , s'afegeix un terme κ per a indicar explícitament aquest tipus d'enllaç. No s'ha d'utilitzar, però, el símbol η^1 , ja que la convenció eta només s'aplica quan s'enllacen àtoms contigus d'un lligand.

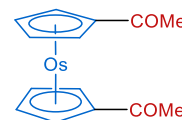


dicarbonyl(η^5 -ciclopentadienuro)(ciclopenta-2,4-dien-1-uro- κ C¹)ferro
o dicarbonyl(η^5 -ciclopentadienil)(ciclopenta-2,4-dien-1-il- κ C¹)ferro

Les molècules discretes que contenen dos lligands η^5 -ciclopentadienil *paral·lels* en una estructura «sandvitx» al voltant d'un metall de transició, com passa en el bis(η^5 -ciclopentadienil)ferro, $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$, s'anomenen genèricament **metalloccens**, i se'ls pot donar noms «ocè», en aquest cas ferrocè. Aquests noms «ocè» segueixen la mateixa nomenclatura de substitució que els noms dels hidrocarburs progenitors, i els noms dels grups substituïents prenen les formes «oceníl», «ocendiil», «ocentriil» (amb la inserció dels locatius adequats).



1-ferroceniletan-1-ona



1,1'-(osmocè-1,1'-diil)di(etan-1-ona)

Per convenció, els compostos organometàllics dels **elements dels grups principals** s'anomenen mitjançant la nomenclatura de substitució, si contenen elements dels grups 13-16, o segons la nomenclatura d'addició si l'element és dels grups 1 i 2. En alguns casos, si es vol transmetre poca informació estructural, s'utilitza la nomenclatura de composició. Per a més detalls, vegeu el llibre vermell.¹⁵

2.7 Fórmules dels compostos de coordinació

Les fórmules en línia dels compostos de coordinació s'escriuen entre claudàtors per a especificar-ne la composició de l'entitat. A la taula 7 es descriu el procés general de construcció. En primer lloc, es col·loca el símbol de l'àtom central seguit dels símbols o abreviatures dels lligands (en ordre alfabètic segons la forma en què es presenten a la fórmula). Sempre que es pugui, l'àtom coordinador s'hauria de situar més a prop de l'àtom central per tal de proporcionar més informació sobre l'estructura del complex. Per aquesta mateixa raó, si és possible, els lligands pont s'han de col·locar entre els símbols dels àtoms centrals (vegeu-ne exemples a la secció 2.5). Generalment, les fórmules i abreviatures dels lligands es col·loquen dins de signes d'inserció (tret que el lligand contingui un únic àtom), i cal recordar que els claudàtors es reserven per a definir l'esfera de coordinació. Si el complex conté diversos lligands iguals, s'afegeix un subíndex a la dreta del signe d'inserció o al símbol del lligand.

Taula 7. Generació de fórmules en línia dels complexos

Estructura		
Àtom(s) central(s)	Co	2 × Re
Lligands	NH ₃ , OH ₂	Cl
Construcció de la fórmula	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{OH}_2)]\text{Cl}_3$	$\text{Cs}_2[\text{Cl}_4\text{ReReCl}_4]$
Estructura		
Àtom(s) central(s)	Co	Pt
Lligands abreujats	2,2',2'',2'''-(etan-1,2-diil)dinitrilo)tetraacetat → edta	Cl trifenilfosfà → PPh ₃
Construcció de la fórmula	$\text{Ba}[\text{Co}(\text{edta})]_2$	$[\text{PtCl}_2(\text{PPh}_3)_2]$

14. Taula IR-10.4 de la referència de la nota 5.

15. Secció IR-10.3 de la referència de la nota 5.

2.8 Oxoàcids inorgànics i compostos relacionats

Els oxoàcids inorgànics i els anions formats per la pèrdua dels seus hidrons àcids (H^+) tenen noms tradicionals, que són molt coneguts i es poden trobar en molts llibres de text: àcid sulfúric, sulfat; àcid nítric, nitrat; àcid nítrós, nitrit; àcid fosfòric, fosfat; àcid arsènic, arsenat; àcid arsenós, arsenit; àcid silícic, silicat; etc. Aquests noms es conserven en la nomenclatura de la IUPAC per dos motius, en primer lloc, pel fet que, a la pràctica, gairebé són els únics noms utilitzats i, en segon lloc, perquè tenen un paper especial en la nomenclatura orgànica quan es necessiten noms per als derivats orgànics. Tanmateix, tots els oxoàcids i els seus derivats es poden considerar com a entitats de coordinació i es poden anomenar sistemàticament mitjançant la nomenclatura d'addició (taula 8).¹⁶

Taula 8. Exemples d'oxoàcids inorgànics i derivats

Fórmula	Nom tradicional o orgànic	Nom d'addició
H_2SO_4 o $[S(O)_2(OH)_2]$	àcid sulfúric	dihidroxidodioxidosofre
$(CH_3)_2SO_4$ o $[S(O)_2(OMe)_2]$	sulfat de dimetil	dimetoxidodioxidosofre o dimetanolatodioxidosofre
H_2PHO_3 o $[P(H)(O)(OH)_2]$	àcid fosfònic*	dihidroxidohidrurooxidofòsfor
$PhP(O)(OH)_2$	àcid fenilfosfònic	(fenil)dihidroxidooxidofòsfor

*NOTA: El terme «àcid fosforós» s'ha utilitzat en la bibliografia tant per a les espècies anomenades àcid fosfònic de la taula 8 com per a les que tenen la fórmula $P(OH)_3$, trihidroxidofòsfor. Aquest segon sentit s'empra en la nomenclatura orgànica.

Els noms tradicionals dels oxoàcids es poden modificar segons les regles establertes per a anomenar els compostos formats per una **substitució funcional**:¹⁶ així, «tio» indica la substitució de =O per =S; els prefixos «fluoro», «cloro», etc., o les terminacions «fluorídric», «clorídric», etc., indiquen la substitució de —OH per —F, —Cl, etc.; «peroxi»/«peroxo», indica la substitució de —O— per —OO—, i, així, successivament (taula 9).

Si se substitueixen tots els grups hidroxil d'un oxoàcid, el compost resultant ja no és un àcid i no s'anomena com a tal, sinó que tindrà un **nom de classe funcional**¹⁶ com, per exemple, un halogenur d'àcid o una amida. Aquests tipus de compostos es poden anomenar sistemàticament, també, mitjançant la nomenclatura d'addició (taula 10).

En els **noms amb hidrogen** s'utilitza una construcció especial, que permet indicar els hidrons units a un anió sense especificar exactament en quin punt s'hi uneixen. En aquests noms, la paraula «hidrogen» es col·loca al començament del nom amb un prefix multiplicador (si escau) i sense espai entre aquest i la resta del nom, que es posa entre parèntesis. Per exemple, dihidrogen(difosfat)(2-) indica $H_2P_2O_7^{2-}$, un ió difosfat al qual s'han afegit dos hidrons, amb les posicions desconegudes o almenys no especificades.

Els noms comuns dels oxoàcids parcialment deshidronats, com ara hidrogenfosfat, HPO_4^{2-} , i dihidrogenfosfat, $H_2PO_4^-$, es poden considerar casos especials d'aquests noms d'hidrogen. En aquests noms simplificats, s'exclouen el nombre de càrrega i els parèntesis al voltant de la part principal del nom. De nou, aquests anions particulars també es poden anomenar sistemàticament segons la nomenclatura d'addició. En la nomenclatura orgànica, el mot «hidrogen» es col·loca *per separat* en formar els noms anàlegs, per exemple, hidrogen sulfat de dodecil, $C_{12}H_{25}OS(O)_2OH$. Aquesta diferència entre els dos sistemes té com a conseqüència que l'ió HCO_3^- , que conté carboni, es pot anomenar correctament tant «hidrogen carbonat» com «hidrogencarbonat» (però no «bicarbonat»).

Taula 9. Exemples de derivats d'oxoàcids inorgànics i anions formats per substitució funcional

Fórmula	Nom que indica la substitució funcional	Nom d'addició
H_3PS_4 o $[P(S)(SH)_3]$	àcid tetratiófosfòric o àcid fosforotetratióic	tris(sulfanuro)sulfurofòsfor
H_2PFO_3 o $[PF(O)(OH)_2]$	àcid fluorofosfòric o àcid fosforofluorídric	fluorurodihidroxido=oxidofòsfor
$S_2O_3^{2-}$ o $[S(O)_3(S)]^{2-}$	tiosulfat o sulfurotióat	trioxidosulfurosulfat(2-)
$[O_3S(\mu-O_2)SO_3]^{2-}$	peroxidisulfat	vegeu la secció 2.5

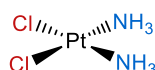
Taula 10. Exemples de classes de noms funcionals i els seus corresponents noms d'addició

Fórmula	Nom de la classe funcional	Nom d'addició
PCl_3O	triclòrur de fosforil	triclòrurrooxidofòsfor
SCl_2O_2	diclòrur de sulfuril	diclòrurrodioxidosofre
$S(NH_2)_2O_2$	diamida sulfúrica	diamidodioxidosofre

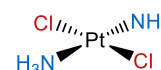
3 DESCRIPTORS ESTEREOQUÍMICS

La geometria aproximada al voltant de l'àtom central es descriu mitjançant un **símbol del poliedre** davant del nom. El símbol es forma amb lletres majúscules en cursiva que n'indiquen la geometria i un número que indica el nombre de coordinació. Els símbols del poliedre més freqüents són *OC-6* (octaedre), *SP-4* (planoquadrat), *T-4* (tetraedre), *SPY-5* (piràmide quadrangular) i *TBPY-5* (bipiràmide trigonal). Hi ha disponibles llistes més completes.¹⁷

Les posicions relatives dels lligands al voltant d'un àtom central es poden descriure utilitzant un **índex de configuració** definit per a cada geometria,¹⁸ d'acord amb les regles de prioritats de Cahn-Ingold-Prelog dels grups de lligands,¹⁹ i pot canviar si canvien els lligands, fins i tot si la geometria continua sent la mateixa. També es pot descriure la configuració absoluta. En general, els índexs de configuració només s'utilitzen si hi ha més d'una possibilitat i si s'ha d'identificar un estereoisòmer concret. Els descriptors estereoquímics per als complexos de platí planoquadrats que es mostren a continuació són (*SP-4-2*) i (*SP-4-1*), per als isòmers *cis* i *trans*, respectivament. En situacions particulars es poden emprar altres descriptors estereoquímics tradicionals. Així, els dos isòmers possibles per a un centre planoquadrat coordinat per dos lligands d'un tipus i dos d'un altre s'anomenen *cis*- (quan els lligands idèntics es coordinen l'un al costat de l'altre) o *trans*- (quan estan oposats l'un a l'altre).



cis-diamminadichloroplatí(II)



trans-diamminadichloroplatí(II)

Els centres octaèdrics amb quatre lligands d'un tipus i dos d'un altre també es poden anomenar *cis*- (quan els dos lligands idèntics es coordinen l'un al costat de l'altre) o *trans*- (quan estan oposats). Els centres octaèdrics amb tres lligands d'un tipus i tres lligands d'un altre es poden descriure com a *fac*- (facials), quan els tres lligands idèntics es troben als vèrtexs d'una cara de l'octaedre, o bé *mer*- (meridional), quan no s'hi troben.

4 RESUM

Aquest document proporciona un resum de les regles essencials de nomenclatura per a obtenir els noms i les fórmules de compostos inorgànics, compostos de coordinació i compostos organometàl·lics. El document complementari sobre els sistemes de nomenclatura de la **química orgànica**² també pot ser d'utilitat als lectors.

Els noms i les fórmules només compleixen una part del seu paper quan es creen i s'utilitzen per a descriure o identificar compostos, per exemple, en les publicacions. El seu objectiu no s'assoleix del tot fins que els lectors són capaços d'interpretar amb èxit el nom o la fórmula que llegeixen, per exemple, tot dibuixant el diagrama estructural corresponent. Aquest document també pretén ajudar a la interpretació de noms i fórmules.

Finalment, cal informar que la IUPAC ha elaborat recomanacions sobre la representació gràfica d'estructures químiques i les seves configuracions estereoquímiques.²⁰

17. Taula P5 de la referència de la nota 4; taules IR-9.2 i IR-9.3 de la referència de la nota 5.

18. Secció IR-9.3.3 de la referència de la nota 5.

19. R. S. CAHN, C. INGOLD i V. PRELOG, «Specification of molecular chirality», *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **5** (1966), p. 385-415 i 511; V. PRELOG i G. HELMCHEN, «Basic principles of the CIP-system and proposals for a revision», *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **21** (1982), p. 567-583.

20. J. BRECHER, K. N. DEGTYARENKO, H. GOTTLIEB, R. M. HARTSHORN, G. P. MOSS, P. MURRAY-RUST, J. NYITRAI, W. POWELL, A. SMITH, S. STEIN, K. TAYLOR, W. TOWN, A. WILLIAMS, A. YERIN, «Graphical representation of stereochemical configuration (IUPAC recommendations 2006)», *Pure Appl. Chem.*, **78**, **10** (2006), p. 1897-1970; J. BRECHER, K. N. DEGTYARENKO, H. GOTTLIEB, R. M. HARTSHORN, K.-H. HELMCHEN, J. KAHOVEC, G. P. MOSS, A. MCNAUGHT, J. NYITRAI, W. POWELL, A. SMITH, K. TAYLOR, W. TOWN, A. WILLIAMS, A. YERIN, «Graphical representation standards for chemical structure diagrams (IUPAC recommendations 2008)», *Pure Appl. Chem.*, **80**, **2** (2008), p. 277-410.

16. Capítol IR-8 de la referència de la nota 5.