

## Przedmowa

Oddajemy w Państwa ręce polskie tłumaczenie fundamentalnej publikacji "Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 2005", znanej w środowisku chemicznym jako "Red Book". Niniejsze opracowanie zastępuje poprzednie polskie wydanie z 1998 roku, które było tłumaczeniem "Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990".

Ewolucja nazewnictwa chemicznego jest nieodłącznym elementem rozwoju samej chemii, odpowiadającym na rosnące potrzeby społeczności naukowej. Dynamiczny postęp w dziedzinie wymaga nie tylko tworzenia nazw dla nowo odkrywanych związków, ale także udoskonalania istniejącej terminologii. Szczególnie istotne jest eliminowanie wszelkich niejednoznaczności i doprecyzowanie zasad tam, gdzie mogą pojawiać się wątpliwości interpretacyjne.

Współczesne nazewnictwo chemiczne powinno być jednocześnie systematyczne i przyjazne dla użytkowników - zarówno dla studentów stawiających pierwsze kroki w chemii, jak i dla profesjonalistów mających codzienny kontakt z substancjami chemicznymi. Mając to na uwadze, w 1998 roku rozpoczęto kompleksową rewizję fundamentalnej publikacji "Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990" (Red Book I). Początkowo prace prowadzone były przez Komisję IUPAC ds. Nomenklatury Chemii Nieorganicznej (CNIC), a po reorganizacji IUPAC w 2001 roku, zadanie to przejęła specjalna grupa projektowa działająca w ramach Wydziału Nomenklatury Chemicznej i Reprezentacji Struktur (Wydział VIII).

Dążenie do ujednoczenia systemów nazewnictwa w chemii zaowocowało bliską współpracą między zespołami redakcyjnymi dwóch kluczowych publikacji: zrewidowanej Red Book oraz przygotowywanej nowej wersji "Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations" (Blue Book). Choć koncepcja preferowanych nazw IUPAC (PINs) stanowi fundament nowej Blue Book, jej zastosowanie w chemii nieorganicznej pozostaje kwestią przyszłości - obecnie dotyczy jedynie związków zawierających węgiel. Wprowadzenie PINs do chemii nieorganicznej będzie wymagało rozstrzygnięcia, który z równoważnych systemów nazewnictwa powinien mieć pierwszeństwo.

Nowe wydanie, zastępujące zarówno Red Book I jak i częściowo Red Book II ("Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000"), wprowadza istotne zmiany w organizacji treści. Fundamenty nazewnictwa nieorganicznego przedstawiono w trzech kluczowych rozdziałach, oznaczonych przedrostkiem "IR-": IR-5 (nazewnictwo składu oraz przegląd nazw jonów i rodników), IR-6 (nazwy wodorków macierzystych i nazewnictwo podstawnikowe) oraz IR-7 (nazewnictwo addytywne).

Kolejne rozdziały szczegółowo omawiają praktyczne zastosowanie tych systemów w trzech głównych obszarach: kwasach nieorganicznych i ich pochodnych (IR-8), związkach koordynacyjnych (IR-9) oraz związkach metaloorganicznych (IR-10). W publikacji wyraźnie zaznacza się rosnące znaczenie nazewnictwa addytywnego, wywodzącego się z tradycji nazywania związków koordynacyjnych. Co ciekawe, włączono również przykłady związków organicznych z pogranicza obu chemii, dla których nazewnictwo addytywne okazuje się szczególnie użyteczne, mimo że ich preferowane nazwy IUPAC mogą być tworzone w inny sposób.

Ważnym elementem nowej publikacji jest osobny rozdział IR-10, w całości poświęcony związkom metaloorganicznym. Wyodrębnienie tej tematyki ze związków koordynacyjnych odzwierciedla nie tylko rosnące znaczenie chemii metaloorganicznej, ale także podkreśla szczególny charakter ligandów zdolnych do tworzenia wiązań  $\pi$ .

Rozdział IR-9, dotyczący związków koordynacyjnych, przeszedł gruntowną metamorfozę w porównaniu z jego poprzednikiem (I-10) z Red Book I. Wprowadzono w nim

szereg istotnych zmian: szczegółowo wyjaśniono zastosowanie konwencji Z i  $\kappa$ , opracowano nowe zasady szeregowania atomów centralnych w związkach wielordzeniowych, oraz uporządkowano zagadnienia konfiguracji i konstytucji w osobnych sekcjach. Nowością są również symbole wielościennie dla cząsteczek T-kształtnych i o geometrii huśtawkowej, wraz z praktycznymi wskazówkami dotyczącymi ich klasyfikacji.

Znaczące zmiany objęły także rozdział o kwasach nieorganicznych (dawny rozdział I-9 z Red Book I). W obecnej wersji (IR-8) zmodyfikowano koncepcję "nazw wodorowych" oraz - co ciekawe - przywrócono niektóre tradycyjne nazwy z końcówkami "awy" i "owy". Decyzja ta wynikała z potrzeby zachowania spójności z nazewnictwem organicznym, przedstawionym w nowej Blue Book.

Nowa publikacja oferuje szereg praktycznych narzędzi ułatwiających tworzenie nazw związków chemicznych. Szczególnie pomocne są schematy blokowe: ogólny w sekcji IR-1.5.3.5, kierujący do odpowiednich zasad nazewnictwa, oraz specjalistyczny w sekcji IR-9.2.1, dedykowany związkom koordynacyjnym i metaloorganicznym. Dodatkowo, zamieszczono obszerny indeks tematyczny oraz użyteczną tabelę (Tabela IX) prezentującą alternatywne nazwy prostych związków nieorganicznych, jonów i rodników.

W zakresie wzorów chemicznych (rozdział IR-4) wprowadzono istotne uproszczenia i ujednolicenia. Zmodyfikowano zasady kolejności cytowania ligandów, uniezależniając je od ładunku, oraz uproszczono system znaków otaczających, dostosowując go do nomenklatury organicznej. Dla większej przejrzystości zaleca się stosowanie skrótów ligandów, których kompletną listę wraz z odpowiadającymi im wzorami strukturalnymi zawarto w Tabelach VII i VIII.

Niektóre rozdziały z Red Book I przeszły znaczącą transformację. Rozdział o chemii ciała stałego (IR-11) ograniczono do podstaw, pozostawiając bardziej zaawansowane zagadnienia publikacjom IUCr. Planowana współpraca między IUPAC a IUCr ma zaowocować kompleksowym nazewnictwem dla tej dynamicznie rozwijającej się dziedziny. Nazewnictwo związków boru, wcześniej stanowiące osobny rozdział, włączono obecnie do rozdziału IR-6, planując bardziej szczegółowe opracowanie w przyszłości.

Publikacja wprowadza też szereg innych modyfikacji: zaktualizowano procedury nazywania nowych pierwiastków, uproszczono nazewnictwo łańcuchów i pierścieni, usunięto nieaktualne sekcje dotyczące polimerów jednonitkowych i starsze wersje układu okresowego. Na uwagę zasługuje systematyzacja nazewnictwa, wprowadzająca między innymi jednolitą końcówkę 'ido' dla anionowych ligandów (np. chlorido, cyjanido, hydrido), co zwiększa spójność całego systemu.

W polskim tłumaczeniu szczególną uwagę poświęcono zachowaniu spójności terminologicznej z tradycją polskiego nazewnictwa chemicznego, jednocześnie wprowadzając aktualne zalecenia IUPAC. Prezentowane zasady zostały opracowane tak, by łączyły przystępność z precyzją i systematycznością oryginału. Kierowaliśmy się zasadą minimalizacji niepotrzebnych zmian - wiele elementów zostało zachowanych w formie znanej z poprzedniego polskiego tłumaczenia.

Szczególną uwagę zwróciliśmy na zachowanie jedności z aktualną nomenklaturą angielską. Przykładowo, zgodnie z najnowszymi zaleceniami IUPAC, w przypadku anionowych ligandów stosujemy wyłącznie końcówkę "ido", mimo że w poprzednim polskim tłumaczeniu występowały dwie końcówki: "ido" oraz "ydo". Zdecydowano się również na stosowanie określenia "jądrowy" zamiast "rdzeniowy" w odniesieniu do kompleksów, co lepiej odpowiada anglojęzycznej terminologii. Takie uproszczenia zwiększają przejrzystość i spójność nomenklatury z jej międzynarodowym odpowiednikiem.

Wprowadziliśmy również pojęcie denticzności ligandów, które odnosi się do liczby grup donorowych w danym ligandzie, wiążących się z centralnym atomem metalu w kompleksie koordynacyjnym. Termin ten, pochodzący od łacińskiego słowa "dentis" (ząb),

zastąpił wcześniej stosowane określenia typu "dentny" (jak "bidentny" czy "didentny") na rzecz "dentyczny", co jest zgodne z nomenklaturą anglojęzyczną i pozwala uniknąć tworzenia sztucznych konstrukcji językowych.

W przypadkach, gdy istnieją ugruntowane w języku polskim terminy równoważne nazwom systematycznym, zostały one odpowiednio oznaczone i opisane, co ułatwia swobodne poruszanie się między nomenklaturą tradycyjną a nowoczesną.

## **IR-1 Ogólne cele, funkcje i metody nomenklatury chemicznej**

### **Spis treści**

#### **IR-1.1 Wprowadzenie**

#### **IR-1.2 Historia nomenklatury chemicznej**

##### **IR-1.2.1 Międzynarodowa współpraca w zakresie nomenklatury nieorganicznej**

#### **IR-1.3 Cele nomenklatury chemicznej**

#### **IR-1.4 Funkcje nomenklatury chemicznej**

#### **IR-1.5 Metody nomenklatury nieorganicznej**

##### **IR-1.5.1 Formułowanie zasad**

##### **IR-1.5.2 Tworzenie nazw**

##### **IR-1.5.3 Systemy nomenklatury**

###### **IR-1.5.3.1 Informacje ogólne**

###### **IR-1.5.3.2 Nomenklatura składu**

###### **IR-1.5.3.3 Nomenklatura podstawnikowa**

###### **IR-1.5.3.4 Nomenklatura addytywna**

###### **IR-1.5.3.5 Ogólne procedury nadawania nazw**

#### **IR-1.6 Zmiany w stosunku do poprzednich zaleceń IUPAC**

##### **IR-1.6.1 Nazwy kationów**

##### **IR-1.6.2 Nazwy anionów**

##### **IR-1.6.3 Sekwencja pierwiastków w Tabeli VI**

##### **IR-1.6.4 Nazwy ligandów anionowych w (formalnych) związkach koordynacyjnych**

##### **IR-1.6.5 Wzory (formalnych) związków koordynacyjnych**

##### **IR-1.6.6 Nazwy addytywne związków wielordzeniowych**

##### **IR-1.6.7 Nazwy kwasów nieorganicznych**

##### **IR-1.6.8 Związki addycyjne**

##### **IR-1.6.9 Różne**

#### **IR-1.7 Zalecenia dotyczące nomenklatury w innych dziedzinach chemii**

#### **IR-1.8 Odnośniki**

## **IR-1.1 Wprowadzenie**

Rozdział IR-1 rozpoczyna się od wszechstronnego wprowadzenia w świat nomenklatury chemicznej. Najpierw przedstawia jej historyczny rozwój, a następnie omawia podstawowe cele i metody. Szczególnie praktycznym elementem jest schemat blokowy w sekcji IR-1.5.3, pomagający wybrać najodpowiedniejszy system nazewnictwa dla konkretnego związku. Rozdział kończy się przeglądem najważniejszych zmian w stosunku do poprzednich zaleceń oraz pokazuje, jak nomenklatura nieorganiczna wpisuje się w szerszy kontekst chemii.

## **IR-1.2 Historia nomenklatury chemicznej**

Historia nomenklatury chemicznej to fascynująca podróż od czasów alchemii do współczesności. Początkowo nazwy związków chemicznych były raczej przypadkowe i nie mówiły wiele o ich składzie. Przełom nastąpił w 1782 roku, gdy Guyton de Morveau stworzył pierwszy systematyczny sposób nazywania związków chemicznych. Jego wizjonerskie podejście, zakładające, że nazewnictwo powinno ułatwiać zrozumienie i zapamiętywanie, do dziś pozostaje aktualne.

System ten został następnie rozwinięty przez zespół wybitnych chemików - Lavoisiera, Bertholleta i de Fourcroya, a później udoskonalony przez Berzeliusa, który dostosował go do języków germańskich. Co ciekawe, pierwotny system powstał jeszcze przed ogłoszeniem teorii atomowej Daltona i opierał się głównie na koncepcji pierwiastków tworzących związki z tlenem.

Rozwój teorii atomowej przyniósł nowe wyzwania w nazewnictwie, szczególnie w kontekście dokładnego odzwierciedlenia składu związków. Kolejnym przełomem było odkrycie jonów przez Arrheniusa, które wymusiło stworzenie systemu nazewnictwa dla naładowanych cząstek. Przyjęto wówczas praktyczne rozwiązanie: kationy zachowały nazwy odpowiednich metali, a aniony otrzymały zmodyfikowane nazwy pierwiastków niemetalicznych.

Szczególnie istotny wkład w rozwój nomenklatury wniósł Werner, tworząc system nazewnictwa związków koordynacyjnych. Jego innowacyjne podejście nie tylko opisywało skład związków, ale także ich strukturę, wprowadzając system addytywny, który okazał się na tyle uniwersalny, że można go było adaptować do innych dziedzin chemii.

## **IR-1.3 Międzynarodowa współpraca w zakresie nomenklatury nieorganicznej**

Podczas gdy konferencja w Genewie w 1892 roku stworzyła podstawy międzynarodowego systemu nazewnictwa związków organicznych, chemia nieorganiczna przez długi czas nie miała swojego ujednoliconego systemu. W praktyce funkcjonowało wiele różnych metod nazywania tych samych związków, co często prowadziło do nieporozumień w komunikacji naukowej.

Pierwsze próby uporządkowania nazewnictwa podjęto już w 1886 roku, kiedy Brytyjskie i Amerykańskie Towarzystwo Chemiczne rozpoczęły współpracę w tej dziedzinie. W 1913 roku powstała międzynarodowa komisja ds. nomenklatury, jednak jej prace zostały przerwane przez I wojnę światową. Działania wznowiono w 1921 roku, gdy IUPAC powołał komisję odpowiedzialną za nazewnictwo w chemii nieorganicznej, organicznej i biologicznej.

Znaczący postęp nastąpił w 1940 roku wraz z publikacją pierwszego kompleksowego raportu komisji nieorganicznej. Wprowadzono wtedy istotne zmiany: zastosowanie systemu Stocka do oznaczania stopni utlenienia, określenie kolejności zapisywania składników w związkach binarnych oraz opracowanie jednolitych zasad nazywania związków addycyjnych.

IUPAC systematycznie aktualizował swoje zalecenia. W 1959 roku ukazało się pierwsze wydanie książkowe, następnie w 1971 roku opublikowano drugą rewizję, a w 1977 roku dodatkowy przewodnik "Jak nazwać substancję nieorganiczną". W 1990 roku przeprowadzono kompleksową aktualizację zaleceń, uwzględniając wszystkie istotne zmiany z poprzednich dwóch dekad.

Kolejne prace objęły bardziej specjalistyczne obszary: nomenklaturę polianionów, kompleksów metali z tetrapiolami, nieorganicznych związków łańcuchowych i pierścieniowych oraz związków interkalacyjnych grafitu. Te zagadnienia, wraz z aktualizacjami dotyczącymi związków modyfikowanych izotopowo, wodorków azotu i ich pochodnych, zostały zebrane w siedmiu rozdziałach "Nomenklatury Chemii Nieorganicznej II" z 2000 roku. Osobny rozdział (IR-10) poświęcono nomenklaturze związków metaloorganicznych pierwiastków przejściowych.

## **IR-1.4 FUNKCJE NOMENKLATURY CHEMICZNEJ**

Pierwszy poziom nomenklatury, wykraczający poza przypisywanie całkowicie zwyczajowych nazw, dostarcza pewnych systematycznych informacji o substancji, ale nie pozwala na wnioskowanie o jej składzie. Większość powszechnie stosowanych nazw kwasów tlenowych (np. kwas siarkowy, kwas nadchlorowy) i ich soli należy do tej kategorii. Takie nazwy można określić jako półsystematyczne i dopóki są używane dla powszechnie występujących materiałów oraz są zrozumiałe dla chemików, są one akceptowalne. Należy jednak pamiętać, że mogą one utrudniać zrozumienie składu osobom o ograniczonym przygotowaniu chemicznym.

Gdy sama nazwa pozwala na wywnioskowanie wzoru stechiometrycznego związku zgodnie z ogólnymi regułami, staje się ona prawdziwie systematyczna. Tylko nazwa na tym drugim poziomie nomenklatury staje się odpowiednia dla celów wyszukiwawczych.

Potrzeba uwzględnienia informacji dotyczących trójwymiarowych struktur substancji szybko wzrosła, dlatego systematyzacja nomenklatury musiała rozszerzyć się do trzeciego poziomu zaawansowania. Niewielu chemików chce używać tak wysokiego stopnia zaawansowania za każdym razem, gdy odnoszą się do związku, ale mogą chcieć to zrobić, gdy jest to wskazane.

Czwarty poziom nomenklatury może być wymagany do tworzenia i korzystania z obszernych indeksów. Ponieważ koszty zarówno dla twórcy, jak i osoby wyszukującej wielokrotnych wpisów dla danej substancji mogą być zbyt wysokie, konieczne staje się opracowanie systematycznych reguł hierarchicznych, które prowadzą do utworzenia jednoznacznej nazwy dla danej substancji.

## **IR-1.5 METODY NOMENKLATURY NIEORGANICZNEJ**

### **IR-1.5.1 Formułowanie reguł**

Nomenklatura chemiczna wymaga ciągłej aktualizacji, ponieważ każde nowe odkrycie naukowe stawia przed systemami nazewnictwa kolejne wyzwania. IUPAC, za pośrednictwem utworzonego w 2001 roku Wydziału Nomenklatury Chemicznej i Reprezentacji Strukturalnej, analizuje wszystkie aspekty nazewnictwa związków nieorganicznych. Wydział ten proponuje najlepsze rozwiązania dla pojawiających się problemów, szczególnie w zakresie tworzenia nazw i zapisywania wzorów chemicznych.

Wprowadzane nowe zasady nomenklatury muszą być precyzyjne i jednoznaczne, aby stanowić solidną podstawę do nadawania nazw i zapisywania wzorów w określonych obszarach chemii. Ważne jest przy tym, aby zachować spójność zarówno z dotychczasowymi regułami

nomenklatury nieorganicznej, jak i z zasadami stosowanymi w innych dziedzinach chemii. System musi być też na tyle elastyczny, by mógł uwzględniać rozwój nowych obszarów tej nauki.

### **IR-1.5.2 Konstruowanie nazw**

Tworzenie systematycznych nazw związków nieorganicznych opiera się na łączeniu określonych jednostek według ustalonych zasad, co pozwala przekazać informacje o składzie i strukturze związku. Nazwy pierwiastków (lub ich rdzenie, czasem pochodzące z łaciny), których pełne zestawienie znajduje się w Tabelach I i II zamieszczonych na końcu książki, łączy się z odpowiednimi przyrostkami według określonych systemów nazewnictwa.

Najprostszym przykładem jest system używany do nazywania związków binarnych. Weźmy na przykład  $\text{FeCl}_2$  - dichlorek żelaza. W tej nazwie widzimy połączenie nazw pierwiastków w określonej kolejności (pierwiastek elektrododatni przed elektroujemnym), modyfikację nazwy chloru (końcówka 'ek' wskazująca na anion) oraz przedrostek 'di' określający liczbę atomów chloru.

W procesie tworzenia nazw wykorzystuje się różne elementy, takie jak:

- rdzenie nazw pierwiastków
- przedrostki określające liczebność (zwielokrotniające)
- przedrostki wskazujące podstawniki lub ligandy
- przyrostki oznaczające ładunek
- nazwy i końcówki związków macierzystych
- przyrostki wskazujące grupy charakterystyczne
- wrostki
- lokanty
- deskryptory (strukturalne, geometryczne i przestrzenne)
- znaki interpunkcyjne

### **IR-1.5.3 Systemy nomenklatury**

#### **IR-1.5.3.1 Informacje ogólne**

W chemii nieorganicznej rozwinęło się kilka systemów nazewnictwa, z których każdy ma własną logikę i zasady. Niektóre są szeroko stosowane, inne sprawdzają się w konkretnych dziedzinach. Ta różnorodność pozwala na tworzenie alternatywnych, lecz równie poprawnych nazw dla tej samej substancji. Jednak zbyt duża liczba możliwości może utrudniać komunikację i procesy administracyjne. Problemy pojawiają się szczególnie wtedy, gdy zasady jednego systemu są nieprawidłowo stosowane w innym. W chemii nieorganicznej kluczowe znaczenie mają trzy systemy:

- Nomenklatura składu - używana, gdy znamy tylko stechiometrię związku
- Nomenklatura podstawnikowa
- Nomenklatura addytywna - najbardziej uniwersalna w chemii nieorganicznej

Dwa ostatnie systemy wymagają znajomości budowy (połączeń między atomami) nazywanego związku i są szczegółowo opisane w odpowiednich rozdziałach (IR-5, IR-6 i IR-7).

#### **IR-1.5.3.2 Nomenklatura składu**

Nomenklatura składu koncentruje się na tworzeniu nazw wyłącznie w oparciu o skład substancji, pomijając informacje o ich strukturze. Podstawowym przykładem jest nazwa

stechiometryczna, gdzie nazwy składników (zarówno pojedynczych pierwiastków, jak i jonów wieloatomowych) są łączone z przedrostkami określającymi ich ilość w związku.

W przypadku związków zawierających dwa lub więcej składników, dzieli się je na dwie grupy: elektrododatnie i elektroujemne. Ta zasada przypomina tradycyjny sposób nazywania soli, choć nie sugeruje chemicznego charakteru związków.

Aby prawidłowo utworzyć nazwę, należy przestrzegać określonych zasad dotyczących:

- kolejności wymieniań składników
- stosowania przedrostków zwielokrotniających
- odpowiednich końcówek dla składników elektroujemnych

Zobaczmy to na przykładach:

- tritlen ( $O_3$ )
- chlorek sodu ( $NaCl$ )
- trichlorek fosforu ( $PCl_3$ )
- pentabismutek trisodu ( $Na_3Bi_5$ )
- chlorek wodorotlenek magnezu ( $MgCl(OH)$ )
- cyjanek sodu ( $NaCN$ )
- chlorek amonu ( $NH_4Cl$ )
- octan sodu ( $NaO_2CMe$ )
- 

### IR-1.5.3.3 Nomenklatura podstawnikowa

Nomenklatura podstawnikowa, powszechnie stosowana w chemii organicznej, bazuje na koncepcji wodorku macierzystego, w którym atomy wodoru są zastępowane innymi atomami lub grupami. Ten system jest szczególnie przydatny przy nazywaniu ligandów organicznych w związkach koordynacyjnych i metaloorganicznych, mimo że generalnie stosuje się tam system addytywny.

System ten sprawdza się również przy nazywaniu związków pochodzących od wodorków pierwiastków z grup 13-17 układu okresowego. Pierwiastki te, podobnie jak węgiel, mogą tworzyć łańcuchy i pierścienie z licznymi pochodnymi. Zaletą tego systemu jest to, że nie musimy za każdym razem określać położenia wszystkich atomów wodoru w wodorku macierzystym.

Przy tworzeniu nazw według tej nomenklatury należy przestrzegać zasad dotyczących: nazywania związków macierzystych i podstawników  
kolejności wymieniań podstawników  
określania pozycji podstawników

Przykłady:

1. 1,1-difluorotrisilan,  $SiH_3SiH_2SiHF_2$
2. trichlorofosfan,  $PCl_3$

W ramach nomenklatury podstawnikowej możliwe jest również zastępowanie niektórych atomów niewodorowych innymi atomami lub grupami (podstawienie szkieletowe).

Przykłady:

3. 1,5-dikarba-*kloso*-pentaboran(5),  $B_3C_2H_5$  (CH zastępujące BH)



"Karba" w tych przykładach to przedrostek używany w chemii boranów (związków boru), który oznacza zastąpienie jednostki BH jednostką CH. Czyli gdy w strukturze boranu jeden atom boru (B) wraz z przyłączonym do niego wodorem (H) zostaje zastąpiony przez atom węgla (C) z wodorem (H), używamy przedrostka "karba".

4. kwas antymonoroditiowy,  $H_3SbO_2S_2$

System ten obejmuje również operacje polegające na usuwaniu atomów.

Przykład:

5. 4,5-dikarba-9-debor-*kloso*-nonaboran(2-)  $[B_6C_2H_8]^{2-}$  (utrata BH)

"Debor" (przedrostek "de-" + "bor") oznacza usunięcie/utrąę jednostki borowej (BH) ze struktury. Przedrostek "de-" wskazuje na operację usuwania czegoś ze struktury.

### IR-1.5.3.4 Nomenklatura addytywna

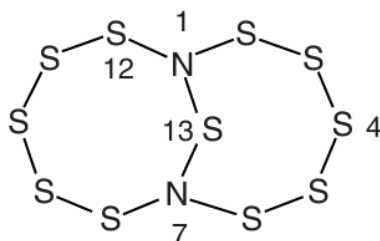
Nomenklatura addytywna opisuje związki chemiczne jako połączenie atomu centralnego (lub atomów centralnych) z dołączonymi do niego ligandami. Szczególnym przypadkiem jest system używany do związków koordynacyjnych, czasem nazywany nomenklaturą koordynacyjną. Jednak jego zastosowanie jest znacznie szersze - sprawdza się przy nazywaniu kwasów nieorganicznych, związków metaloorganicznych oraz wielu prostych cząsteczek i jonów (pełna lista znajduje się w Tabeli IX). Istnieje też oddzielny system addytywny, który świetnie sprawdza się przy nazywaniu struktur łańcuchowych i pierścieniowych.

Systemy te zawierają szczegółowe zasady dotyczące:

- nazewnictwa ligandów
- kolejności wymieniaania ligandów i atomów centralnych
- oznaczania ładunków i niesparowanych elektronów
- wskazywania miejsc przyłączenia w złożonych ligandach
- określania zależności przestrzennych

Przykłady:

1.  $PCl_3$ , trichloridofosfor
2.  $[CoCl_3(NH_3)_3]$ , triaminatrichloridokobalt
3.  $H_3SO_4^+$  ( $=[SO(OH)_3]^+$ ), trihydroksidoooksidosiarka(1+)
4.  $[Pt(\eta^2-C_2H_4)Cl_3]^-$ , trichlorido( $\eta^2$ -eten)platynian(1-)
5.  $HONH^\bullet$ , hydridohydroksidoazot(•)
- 6.



1,7-diazaundekasiarka-[012.1<sup>1,7</sup>]dicykl

### IR-1.5.3.5 Ogólne procedury nazewnictwa

Każdy z trzech podstawowych systemów nomenklatury może utworzyć inną, ale jednoznaczną nazwę dla tego samego związku, co widać na przykładzie  $\text{PCl}_3$ . To, który system wybierzemy, zależy od rodzaju związku nieorganicznego i od tego, jak szczegółowe informacje chcemy przekazać. Poniższe przykłady pokazują, jakie aspekty warto rozważyć przed wyborem odpowiedniej nazwy.

Chemia nieorganiczna, a wraz z nią jej nomenklatura, nie funkcjonuje w oderwaniu od innych dziedzin chemicznych. Dla osób pracujących na styku różnych obszarów chemii, IUPAC przygotował szereg przydatnych materiałów. Obejmują one zarówno ogólne zasady nazewnictwa chemicznego, jak i szczegółowe wytyczne dla chemii organicznej, biochemicznej, analitycznej i makromolekularnej. IUPAC opracował również słownik terminów z chemii bionieorganicznej, zbiór terminologii chemicznej oraz zestaw wielkości, jednostek i symboli używanych w chemii fizycznej.

Przykłady:

1.  $\text{NO}_2$

Tutaj musimy zdecydować: czy chcemy po prostu nazwać związek o danym wzorze? A może ważne jest podkreślenie, że to rodnik? Czy istotne jest zaznaczenie układu atomów ONO?

2.  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

Tu pojawia się wybór: czy wystarczy informacja o proporcjach siarczanu diglinu i wody (1:12), czy może ważne jest zaznaczenie obecności jonów heksaakwaglinu(3+)?

3.  $\text{H}_2\text{P}_3\text{O}_{10}^{3-}$

W tym przypadku mamy opcje: czy chcemy zaznaczyć, że to kwas trifosforowy bez trzech jonów wodoru(1+)? Czy ważne jest określenie, z których pozycji te jony zostały usunięte? Pomocą w wyborze właściwej metody nazewnictwa służy schemat blokowy znajdujący się na Rysunku IR-1.1

### IR-1.6 ZMIANY W STOSUNKU DO POPRZEDNICH ZALECEŃ IUPAC

W tej części przedstawiamy najważniejsze zmiany, jakie zostały wprowadzone w aktualnych zaleceniach w porównaniu z poprzednimi publikacjami IUPAC dotyczącymi nomenklatury. Te modyfikacje miały na celu stworzenie bardziej logicznego i spójnego systemu nazewnictwa, który, gdzie to możliwe, jest zgodny z zasadami przedstawionymi w publikacji "Nomenklatura Chemii Organicznej, Zalecenia IUPAC" przygotowywanej przez Królewskie Towarzystwo Chemiczne (pozycja 21).

#### IR-1.6.1 Nazwy kationów

W poprzednich publikacjach (pozycje 11 i 19) niektóre kationy pochodzące od wodorków macierzystych otrzymały nazwy, które przypominają nomenklaturę podstawnikową, ale nie stosują się do jej zasad. Na przykład, według tych publikacji,  $\text{NH}_4^+$  mógł być nazwany "hydrazynium(2+)". Problem w tym, że sama końcówka 'ium' już wskazuje na dodanie jonu wodorowego ( $\text{H}^+$ ), a więc sugeruje ładunek. Dlatego obecnie, zarówno w

Sekcji IR-6.4.1, jak i w pozycji 21, kation ten nazywamy "hydrazynediium" lub "diazanediium" - bez podawania wartości ładunku.

### **IR-1.6.2 Nazwy anionów**

Przy tworzeniu systematycznych nazw anionów spójność osiąga się poprzez bezwyjątkowe przestrzeganie następujących reguł:

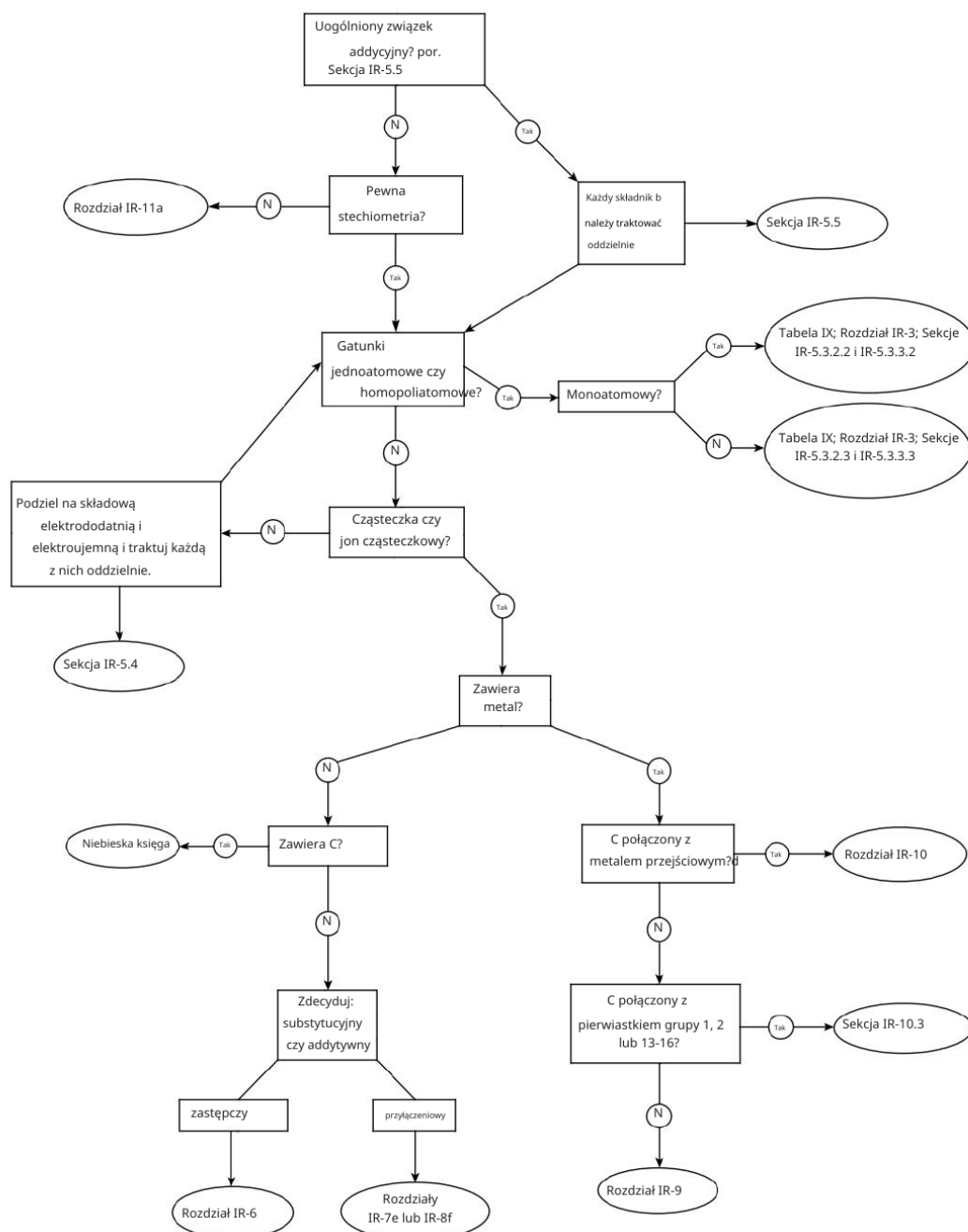
- (I) Nazwy składu anionów homopoliatomowych (zbudowanych z atomów tego samego pierwiastka) kończą się na 'ek'.

Przykłady:

$I_3^-$ , trijodek(1-)

$O_2^{2-}$ , dioksydek(2-)

- (ii) Nazwy anionów pochodzących od wodorków macierzystych, oparte na formalnym usunięciu wodoru(1+), kończą się na 'ek'.



Rysunek IR-1.1. Ogólne wytyczne dotyczące nazywania związków i innych indywiduów chemicznych.

- Rozdział IR-11 dotyczy nomenklatury ciała stałego.
- Każdy pojedynczy składnik jest nazywany zgodnie ze wskazaną ścieżką. Pełna nazwa jest następnie tworzona zgodnie z zaleceniami w odpowiedniej Sekcji Rozdziału IR-5.
- Zasadniczo związek znajduje się poza zakresem tej książki. Kilka związków węgla jest nazwanych w Tabelach IR-8.1, IR-8.2 i IX, ale poza tym czytelnik jest odsyłany do Niebieskiej Księgi.
- Cyjanki związane wiązaniem  $\sigma$  są traktowane jako związki koordynacyjne, patrz Rozdział IR-9.
- Indywiduum chemiczne może być nazwane jako związek typu koordynacyjnego (Sekcje IR-7.1 do IR-7.3) lub jako łańcuch lub pierścień (Sekcja IR-7.4).

f) Dla kwasów nieorganicznych.

Przykłady:

3.  $\text{HNNH}^-$ , hydrazyno-1,2-diid
4.  $\text{MeNH}^-$ , metanoaminid
5. porfirino-21,23-diid

(iii) Nazwy addytywne anionów kończą się na 'an'.

Przykład:

6.  $\text{PS}_4^{3-}$ , tetrasulfidofosforan(3-)

Te reguły obowiązują teraz niezależnie od tego, czy anion jest rodnikiem czy nie, co prowadzi do zmian w stosunku do pozycji 22 dla nazw addytywnych niektórych anionorodników. Na przykład,  $\text{HSSH}^-$  było nazywane bis(hydridosiarczek)(S-S)(1-), ale teraz jest nazywane bis(hydridosiarczan)(S-S)(1-).

Występują również różnice w stosunku do pozycji 11 i 19, gdzie niektórym anionom pochodzącym od wodorków macierzystych brakowało lokantów i dodawano im liczbę ładunku. Na przykład, w pozycji 19 jedną z nazw dla  $\text{HNNH}^-$  było hydrazyd(2-), podczas gdy teraz jest to hydrazyno-1,2-diid.

### IR-1.6.3 Sekwencja pierwiastków w Tabeli VI

W publikacji "Nomenklatura Chemii Nieorganicznej, Zalecenia IUPAC 1990" (pozycja 11), pozycja tlenu w niektórych sekwencjach pierwiastków była traktowana jako wyjątek. Takie wyjątki zostały usunięte, a sekwencja pierwiastków z Tabeli VI jest teraz ściśle przestrzegana. W szczególności, tlen jest traktowany jako składnik elektrododatni w stosunku do każdego pierwiastka z grupy fluorowców przy tworzeniu nazw składu (Sekcja IR-5.2) i odpowiadających im wzorów (Sekcja IR-4.4.3) dla związków binarnych. W rezultacie otrzymujemy na przykład wzór  $\text{OCl}_2$  i nazwę dichlorek tlenu, zamiast wzoru  $\text{ClO}_2$  i nazwy ditlenek chloru.

W pozycji 11 wzory związków międzymetalicznych również podlegały wyjątkowej regule, chociaż nie podano wskazówek dotyczących nazywania takich związków, a termin "związek międzymetaliczny" nie został zdefiniowany. Problem polega na zdefiniowaniu terminu "metal". Dlatego obecnie nie podejmuje się prób tworzenia osobnych przepisów dotyczących wzorów ani nazw związków międzymetalicznych. Podkreśla się jednak, że obecne zalecenia dopuszczają pewną elastyczność w zakresie wzorów i nazw składu związków trójskładnikowych, czteroskładnikowych itd. Kilka zasad porządkowania jest często jednakowo akceptowalnych (patrz Sekcje IR-4.4.2 i IR-4.4.3).

Sekwencja pierwiastków z Tabeli VI jest również przestrzegana przy porządkowaniu atomów centralnych w związkach wielordzeniowych w celu tworzenia nazw addytywnych (patrz Sekcja IR-1.6.6).

### IR-1.6.4 Nazwy ligandów anionowych w (formalnych) indywidualach koordynacyjnych

Obecnie stosowana reguła, bez wyjątków, mówi, że nazwy anionów kończące się odpowiednio na 'ek', 'yn' i 'an' są zmieniane tak, by kończyły się odpowiednio na 'ido', 'ino' i 'ano' przy

modyfikacji nazwy ligandu do użycia w nomenklaturze addytywnej (Sekcje IR-7.1.3 i IR-9.2.2.3). Wiąże się to z kilkoma zmianami w stosunku do pozycji 11 i 22.

Niektóre proste ligandy historycznie (i w pozycji 11) były reprezentowane w nazwach przez formy skrócone: fluoro, chloro, bromo, jodo, hydrokso, hydro, cyjano, okso, itd. Zgodnie z powyższą regułą, obecnie są to: fluorido, chlorido, bromido, jodido, hydroksido, hydrido, cyjanido, oksido, itd. W szczególności, przedrostek 'tio' jest teraz zarezerwowany dla nomenklatury zastępowania funkcyjnego (patrz Sekcja IR-8.6), a ligand  $S^{2-}$  jest nazywany sulfido.

W wielu przypadkach nazwy (formalnie) anionowych ligandów uległy zmianie w wyniku modyfikacji nomenklatury samych anionów (patrz Sekcja IR-1.6.2). Na przykład, ligand  $^{-}HNNH^{-}$  jest teraz nazywany hydrazyno-1,2-diido (Przykład 3 w Sekcji IR-1.6.2), a  $HNCO^{\bullet-}$  było (hydridonitrido)oksidowęglan(1-) w pozycji 22, ale teraz jest nazywane (hydridonitrato)oksidowęglan( $\cdot$ 1-).

Szczególą uwagę poświęcono zapewnieniu prawidłowych nazw i końcówek dla ligandów organicznych. Tak więc, w odniesieniu do Przykładów 4 i 5 w Sekcji IR-1.6.2, używa się teraz metanoaminido zamiast metaminato, a ligand porfiro-21,23-diido zamiast nazwy porfirinato(2-) (która jest używana w pozycji 11).

Systematyczne nazwy ligandów organicznych podane w Tabeli VII są teraz zgodne z nazwami anionów utworzonymi według reguł z pozycji 21. W wielu przypadkach różnią się one od nazw podanych jako systematyczne w pozycji 11.

#### **IR-1.6.5 Formuły dla (formalnych) związków koordynacyjnych**

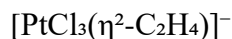
W formułach związków koordynacyjnych ligandy są teraz uporządkowane alfabetycznie według skrótu lub wzoru użytego dla ligandu, niezależnie od ładunku (patrz Sekcje IR-4.4.3.2 oraz IR-9.2.3.1).

W odniesieniu do wcześniejszych zasad (Ref. 11), ligandy naładowane były wymieniane przed ligandami neutralnymi. Stosowano zatem dwa różne zasady porządkowania bez wyraźnego powodu poza tradycją. Osoba tworząca formułę musiała zdecydować, czy dany ligand jest naładowany. Taka decyzja nie zawsze jest oczywista.

Na przykład zalecana formuła dla anionu soli Zeise'a to teraz:



W Ref. 11 zapisano to jako:



Zamiana ta wynika z faktu, że chlorek jest anionowy.

#### **IR-1.6.6 Nazwy addytywne układów wielordzeniowych**

System opracowany w publikacji 11, dotyczący nazw addytywnych związków dwu- i wielordzeniowych, został doprecyzowany i częściowo zmieniony ze względu na zachowanie spójności: kolejność wymieniania atomów centralnych w nazwach jest teraz zawsze zgodna z kolejnością, w jakiej występują one w Tabeli VI, przy czym pierwiastek występujący później w tabeli jest wymieniany jako pierwszy (zobacz Sekcje IR-7.3.2 i IR-9.2.5.6).

System ten może być stosowany dla układów wielordzeniowych z dowolnymi atomami centralnymi. W tym systemie kolejność atomów centralnych w nazwie odzwierciedla kolejność, w jakiej są im przypisywane lokanty używane w konwencji kappa (Sekcja IR-9.2.4.2), służące do określenia, które atomy liganda koordynują do których atomów centralnych. Symbole atomów używane na końcu nazwy do wskazania wiązania metal-metal są uporządkowane w podobny sposób. Tak więc na przykład,  $[(\text{CO})_5\text{ReCo}(\text{CO})_4]$  jest obecnie nazywany nonakarbonylo- $1\kappa^5\text{C}, 2\kappa^4\text{C}$ -renkobalt(Re—Co), a nie nonakarbonylo- $1\kappa^5\text{C}, 2\kappa^4\text{C}$ -kobaltrenu(Co—Re) (jak w publikacji 11).

### IR-1.6.7 Nazwy kwasów nieorganicznych

Nazwy kwasów nieorganicznych są omówione osobno w Rozdziale IR-8.

Nazwy opisane w publikacji 11 pod nagłówkiem "nomenklatura kwasów", np. kwas tetraoksosiarkowy, kwas trioksochlorowy(V), zostały zarzucone. Ponadto, format nazw opisanych w publikacji 11 pod nagłówkiem "nomenklatura wodoru" został zmieniony tak, że "wodór" jest zawsze dołączony bezpośrednio do drugiej części nazwy, a ta część jest zawsze ujęta w nawiasy. Liczba ładunku na końcu nazwy oznacza całkowity ładunek.

Przykłady:

$\text{HCrO}_4^-$ , wodoro(tetraoksochromiano)(1-)

$\text{H}_2\text{NO}_3^+$ , diwodoro(trioksoazotano)(1+)

Ograniczona lista nazw tego typu, w których można pominąć znaki nawiasów i liczby ładunków, znajduje się w Sekcji IR-8.5 (wodorowęglan, diwodorofosforan i kilka innych). (Nazwy te nie różnią się od tych w publikacji 11.)

Główną zasadą jest jednak stosowanie nomenklatury addytywnej do tworzenia systematycznych nazw kwasów nieorganicznych. Na przykład, systematyczna nazwa dla diwodorofosforanu,  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ , to dihydroksidodiodoksidofosforan(1-).

Dla wielu kwasów nieorganicznych, używanych jako podstawniki funkcyjne w nomenklaturze organicznej, nazwy podstawników są obecnie konsekwentnie dozwolone w obecnych zaleceniach, chociaż w pełni systematyczne nazwy addytywne są również podane we wszystkich przypadkach w Rozdziale IR-8. Przykładami są kwas fosfinawy, kwas bromowy i kwas nadtlendodisiarkowy. (Niektóre z tych nazw nie występowały w publikacji 11.)

### IR-1.6.8 Związki addycyjne

Formalizm dotyczący związków addycyjnych i innych związków traktowanych jako takie został zracjonalizowany (zobacz Sekcje IR-4.4.3.5 i IR-5.5), aby usunąć wyjątkowe traktowanie związków boru jako składników oraz sprawić, by konstrukcja nazwy była niezależna od wzoru, a raczej samowystarczalna. Tak więc podwójna sól karnalit, gdy jest formalnie rozpatrywana jako związek addycyjny, ma wzór:

$\text{KCl} \cdot \text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

(wzory związków uporządkowane alfabetycznie, woda zawsze na końcu)

i nazwę:

chlerek magnezu — chlerek potasu — woda (1/1/6)

(nazwy składników uporządkowane alfabetycznie)

### IR-1.6.9 Różne

- (i) W obecnych zaleceniach kropka rodnikowa jest traktowana jako opcjonalna we wzorach i nazwach, podczas gdy w publikacji 22 kropka nie jest pomijana w

żadnych nazwach systematycznych. [Na przykład, w publikacji 22, NO jest pokazane jako NO• z nazwą oksidoazot(•).]

- (ii) Kolejność znaków zamykających (Seksja IR-2.2.1) została zmieniona w porównaniu z publikacją 11, aby zapewnić spójność z publikacją 21.
- (iii) Niektóre nazwy zostały ogłoszone jako "preferowane" w publikacjach 20 i 22. To ogłoszenie było przedwczesne i, jak wyjaśniono we wstępie, w obecnych zaleceniach nie wybiera się nazw preferowanych.

## **IR-1.7 ZALECENIA NOMENKLATURY W INNYCH OBSZARACH CHEMII**

Nomenklatura chemii nieorganicznej, podobnie jak sama chemia nieorganiczna, nie rozwija się w izolacji od innych dziedzin, a osoby pracujące w obszarach interdyscyplinarnych znajdują przydatne teksty IUPAC dotyczące ogólnych zasad nomenklatury chemicznej, jak również szczegółowych zagadnień z zakresu chemii organicznej, biochemicznej, analitycznej i makromolekularnej. Inne publikacje IUPAC obejmują słownik terminów w chemii bionieorganicznej, kompendium terminologii chemicznej oraz wielkości, jednostki i symbole w chemii fizycznej. Pozostałe teksty dotyczące nomenklatury chemicznej są podane w publikacji 30.

## **IR-1.8 ODNOŚNIKI**

1. L.B. Guyton de Morveau, *J. Phys.*, 19, 310 (1782); *Ann. Chim. Phys.*, 1, 24 (1798).
2. L.B. Guyton de Morveau, A.L. Lavoisier, C.L. Berthollet and A.F. de Fourcroy, *Méthode de Nomenclature Chimique*, Paris, 1787.
3. A.L. Lavoisier, *Traité Élémentaire de Chimie*, Third Edn., Deterville, Paris, 1801, Vol. I, pp. 70-81, and Vol. II.
4. J.J. Berzelius, *Journal de Physique, de Chimie, et d'Histoire Naturelle*, 73, 253 (1811).
5. A. Werner, *Neuere Anschauungen auf den Gebieten der Anorganischen Chemie*, Third Edn., Vieweg, Braunschweig, 1913, pp. 92-95.
6. *Bull. Soc. Chem. (Paris)*, 3(7), XIII (1892).
7. W.P. Jorissen, H. Bassett, A. Damiens, F. Fichter and H. Remy, *Ber. Dtsch. Chem. Ges. A*, 73, 53-70 (1940); *J. Chem. Soc.*, 1404-1415 (1940); *J. Am. Chem. Soc.*, 63, 889-897 (1941).
8. *Nomenclature of Inorganic Chemistry*, 1957 Report of CNIC, IUPAC, Butterworths Scientific Publications, London, 1959; *J. Am. Chem. Soc.*, 82, 5523-5544 (1960).
9. *Nomenclature of Inorganic Chemistry. Definitive Rules 1970*, Second Edn., Butterworths, London, 1971.
10. *How to Name an Inorganic Substance*, 1977. A Guide to the Use of Nomenclature of Inorganic Chemistry: Definitive Rules 1970, Pergamon Press, Oxford, 1977.
11. *Nomenclature of Inorganic Chemistry*, IUPAC Recommendations 1990, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
12. *Nomenclature of Polyanions*, Y. Jeannin and M. Fournier, *Pure Appl. Chem.*, 59, 1529-1548 (1987).
13. *Nomenclature of Tetrapyrroles*, Recommendations 1986, G.P. Moss, *Pure Appl. Chem.*, 59, 779-832 (1987); *Nomenclature of Tetrapyrroles*, Recommendations 1978, J.E. Merritt and K.L. Loening, *Pure Appl. Chem.*, 51, 2251-2304 (1979).
14. *Nomenclature of Inorganic Chains and Ring Compounds*, E.O. Fluck and R.S. Laitinen, *Pure Appl. Chem.*, 69, 1659-1692 (1997).



15. Nomenclature and Terminology of Graphite Intercalation Compounds, H.-P. Boehm, R. Setton and E. Stumpp, *Pure Appl. Chem.*, 66, 1893-1901 (1994).
16. Isotopically Modified Compounds, W.C. Fernelius, T.D. Coyle and W.H. Powell, *Pure Appl. Chem.*, 53, 1887-1900 (1981).
17. The Nomenclature of Hydrides of Nitrogen and Derived Cations, Anions, and Ligands, J. Chatt, *Pure Appl. Chem.*, 54, 2545-2552 (1982).
18. Nomenclature for Regular Single-strand and Quasi Single-strand Inorganic and Coordination Polymers, L.G. Donaruma, B.P. Block, K.L. Loening, N. Plate, T. Tsuruta, K.Ch. Buschbeck, W.H. Powell and J. Reedijk, *Pure Appl. Chem.*, 57, 149-168 (1985).
19. Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001. (Red Book II.)
20. Nomenclature of Organometallic Compounds of the Transition Elements, A. Salzer, *Pure Appl. Chem.*, 71, 1557-1585 (1999).
21. Nomenclature of Organic Chemistry: IUPAC Recommendations, eds. W.H. Powell and H. Favre, Royal Society of Chemistry, in preparation. [See also, *Nomenclature of Organic Chemistry*, Pergamon Press, Oxford, 1979; *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993*, eds. R. Panico, W.H. Powell and J.-C. Richer, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993; and corrections in *Pure Appl. Chem.*, 71, 1327-1330 (1999)].
22. Names for Inorganic Radicals, W.H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, 72, 437-446 (2000).
23. Principles of Chemical Nomenclature, A Guide to IUPAC Recommendations, G.J. Leigh, H.A. Favre and W.V. Metanomski, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1998.
24. Biochemical Nomenclature and Related Documents, for IUBMB, C. Liébecq, Portland Press Ltd., London, 1992. (The White Book.)
25. Compendium of Analytical Nomenclature. IUPAC Definitive Rules, 1997, Third Edn., J. Inczédy, T. Lengyel and A.M. Ure, Blackwell Science Publications, Oxford, 1998. (The Orange Book.)
26. Compendium of Macromolecular Nomenclature, ed. W.V. Metanomski, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. (The Purple Book. Second edition is planned for publication in 2005). See also *Glossary of Basic Terms in Polymer Science*, A.D. Jenkins, P. Kratochvíl, R.F.T. Stepto and U.W. Suter, *Pure Appl. Chem.*, 68, 2287-2311 (1996); *Nomenclature of Regular Single-strand Organic Polymers*, J. Kahovec, R.B. Fox and K. Hatada, *Pure Appl. Chem.*, 74, 1921-1956 (2002).
27. Glossary of Terms used in Bioinorganic Chemistry, M.W.G. de Bolster, *Pure Appl. Chem.*, 69, 1251-1303 (1997).
28. Compendium of Chemical Terminology, IUPAC Recommendations, Second Edn., eds. A.D. McNaught and A. Wilkinson, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997. (The Gold Book.)
29. Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, Second Edn., eds. I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993. (The Green Book. The third edition is planned for publication in 2005).
30. Nomenclature of Coordination Compounds, T.E. Sloan, Vol. 1, Chapter 3, *Comprehensive Coordination Chemistry*, Pergamon Press, 1987; *Inorganic Chemical Nomenclature, Principles and Practice*, B.P. Block, W.H. Powell and W.C. Fernelius, American Chemical Society, Washington, DC, 1990; *Chemical Nomenclature*, K.J. Thurlow, Kluwer Academic Publ., 1998.

## **IR-2 Gramatyka**

### **SPIS TREŚCI**

#### **IR-2.1 Wprowadzenie**

#### **IR-2.2 Nawiasy**

##### **IR-2.2.1 Informacje ogólne**

##### **IR-2.2.2 Nawiasy kwadratowe**

###### **IR-2.2.2.1 Zastosowanie we wzorach**

###### **IR-2.2.2.2 Zastosowanie w nazwach**

##### **IR-2.2.3 Nawiasy okrągłe**

###### **IR-2.2.3.1 Zastosowanie we wzorach**

###### **IR-2.2.3.2 Zastosowanie w nazwach**

##### **IR-2.2.4 Nawiasy klamrowe**

#### **IR-2.3 Łączniki, znaki plus i minus, pauzy oraz wskaźniki wiązań**

##### **IR-2.3.1 Łączniki**

##### **IR-2.3.2 Znaki plus i minus**

##### **IR-2.3.3 Pauzy**

##### **IR-2.3.4 Specjalne wskaźniki wiązań dla wzorów liniowych**

#### **IR-2.4 Ukośnik**

#### **IR-2.5 Kropki, dwukropki, przecinki i średniki**

##### **IR-2.5.1 Kropki**

##### **IR-2.5.2 Dwukropki**

##### **IR-2.5.3 Przecinki**

##### **IR-2.5.4 Średniki**

#### **IR-2.6 Odstępy**

#### **IR-2.7 Elizje**

#### **IR-2.8 Liczebniki**

##### **IR-2.8.1 Cyfry arabskie**

##### **IR-2.8.2 Cyfry rzymskie**

#### **IR-2.9 Litery pisane kursywą**

#### **IR-2.10 Alfabet grecki**

#### **IR-2.11 Gwiazdki**

#### **IR-2.12 Prymy**

#### **IR-2.13 Przedrostki zwielokrotniające**

#### **IR-2.14 Lokanty**

##### **IR-2.14.1 Wprowadzenie**

##### **IR-2.14.2 Cyfry arabskie**

##### **IR-2.14.3 Lokanty literowe**

#### **IR-2.15 Zasady porządkowania**

##### **IR-2.15.1 Wprowadzenie**

##### **IR-2.15.2 Porządek alfabetyczny**

##### **IR-2.15.3 Inne zasady porządkowania**

###### **IR-2.15.3.1 Porządkowanie pierwiastków na podstawie układu okresowego**

**IR-2.15.3.2 Porządkowanie macierzystych wodorków**  
**IR-2.15.3.3 Porządkowanie grup charakterystycznych w nomenklaturze podstawnikowej**  
**IR-2.15.3.4 Porządkowanie ligandów we wzorach i nazwach**  
**IR-2.15.3.5 Porządkowanie składników we wzorach i nazwach soli**  
**IR-2.15.3.6 Modyfikacja izotopowa**  
**IR-2.15.3.7 Priorytety stereochemiczne**  
**IR-2.15.3.8 Hierarchiczne porządkowanie znaków przestankowych**  
**IR-2.16 Uwagi końcowe**  
**IR-2.17 Bibliografia**

## IR-2.1 Wprowadzenie

Nomenklatura chemiczna może być traktowana jako język. Jako taki składa się ze słów i muszą w nim obowiązywać zasady składni.

W języku nomenklatury chemicznej proste nazwy atomów są słowami. Podobnie jak słowa łączą się tworząc zdanie, tak nazwy atomów łączą się tworząc nazwy związków chemicznych. Składnia to zbiór reguł gramatycznych służących do budowania zdań ze słów. W nomenklaturze składnia obejmuje użycie symboli takich jak kropki, przecinki i łączniki, stosowanie liczb w odpowiednich miejscach oraz kolejność cytowania różnych słów, sylab i symboli.

Ogólnie systemy nomenklatury wymagają rdzenia, na którym buduje się nazwę. Rdzeń ten może być nazwą pierwiastka (np. "kobalt" lub "krzem") w nomenklaturze addytywnej lub może być wyprowadzony z nazwy pierwiastka (np. "krzemo" od "krzem", "ołowio" od "ołów" i przekształcony w nazwę macierzystego wodorku (np. "silan" lub "plumban") do użycia w nomenklaturze podstawnikowej.

Nazwy tworzy się przez dołączanie innych jednostek do tych rdzeni. Wśród najważniejszych jednostek są afiksy. Są to sylaby dodawane do słów lub rdzeni i mogą być przyrostkami, przedrostkami lub wrostkami, w zależności od tego, czy są dodawane po, przed czy wewnątrz słowa lub rdzenia.

Przyrostki i końcówki występują w wielu różnych rodzajach (Tabela III), z których każdy przekazuje określone informacje. Poniższe przykłady ilustrują poszczególne zastosowania. Mogą one określać stopień nienasylenia związku macierzystego w nomenklaturze podstawnikowej: *heksan* i *heksen*, lub fosfina, difosfen, difosfin. Inne końcówki wskazują na charakter ładunku przeniesionego przez cały związek; *kobaltan* odnosi się do anionu. Jeszcze inne przyrostki mogą wskazywać, że nazwa odnosi się do grupy, jak w *heksyl*.

Przedrostki wskazują na przykład podstawniki w nomenklaturze podstawnikowej, jak w nazwie *chlorotrisilan*, oraz ligandy w nomenklaturze addytywnej, jak w nazwie *akwakobalt*. Przedrostki wielokrotniające (Tabela IV) mogą być używane do wskazania liczby składników lub ligandów, np. *heksaakwakobalt*. Przedrostki mogą być również używane do opisanie typów strukturalnych lub innych cech strukturalnych związków; przedrostki geometryczne i strukturalne są wymienione w Tabeli V. Kolejność przedrostków w nomenklaturze podstawnikowej jest omówiona w Rozdziale IR-6, a w nomenklaturze addytywnej w Rozdziałach IR-7, IR-9 i IR-10.

Do uzupełnienia opisu związku mogą być używane także inne oznaczenia. Obejmują one wartość ładunku jonowego, np. *heksaakwakobalt(2+)*, lub alternatywnie, wartość stopienia utlenienia atomu centralnego, np. *heksaakwakobalt(II)*.

Wskazanie atomu centralnego i ligandów zazwyczaj nie stanowi problemu w przypadku kompleksów jednojądrowych, natomiast może być trudniejsze w związkach wielojądrowych, w których to nazwania wymaga kilka atomów centralnych np. w wielojądrowych związkach koordynacyjnych, czy też w związkach łańcuchowych i pierścieniowych. W każdym przypadku musi zostać ustalony porządek pierwszeństwa lub hierarchia. Hierarchia grup funkcyjnych jest ustaloną cechą nomenklatury podstawnikowej. Tabela VI przedstawia kolejność pierwiastków stosowaną w nomenklaturze składnikowej i addytywnej.

Rozdział ten ma na celu pokierowanie użytkownikom nomenklatury w tworzeniu nazw lub wzorów związków nieorganicznych, a także pomoc w sprawdzeniu, czy utworzona nazwa lub wzór w pełni przestrzega ustalonych zasad. Różne narzędzia stosowane w nazwach (lub wzorach) są opisane kolejno poniżej, wraz z ich znaczeniami i zakresem zastosowania.

## IR-2.2 NAWIASY

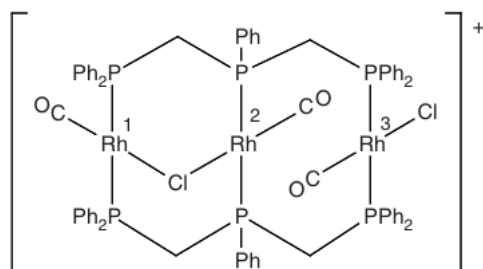
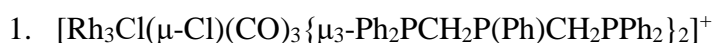
### IR-2.2.1 Informacje ogólne

W nomenklaturze chemicznej stosuje się trzy rodzaje nawiasów: klamry { }, nawiasy kwadratowe [ ] i nawiasy okrągłe ( ).

We wzorach znaki te są używane w następującej kolejności: [ ], [( )], [{( )}], [{{( )}}], [{{{( )}}} ], itd. Nawiasy kwadratowe są zwykle używane tylko do zamykania całych wzorów. Nawiasy okrągłe i klamry są następnie używane naprzemiennie (zobacz także Rozdziały IR-4.2.3 i IR-9.2.3.2). Istnieją jednak pewne szczególne zastosowania nawiasów kwadratowych we wzorach, porównaj z Rozdziałem IR-2.2.2.1.

W nazwach kolejność zapisu nawiasów jest następująca: ( ), [( )], [{( )}], ({{( )}}) itd. Jest ona stosowana w nomenklaturze podstawnikowej, patrz Rozdział P-16.4 w pozycji literaturowej 1. (Zobacz także Rozdział IR-9.2.2.3 dotyczący użycia nawiasów w nazwach ligandów).

Przykład



trikarbonylo-1κC,2κC,3κC-μ-chlorido-1:2κ<sup>2</sup>Cl-chlorido-3κCl-bis{μ<sub>3</sub>-bis[(difenylfosfino)metylo]-1κP:3κP'-fenylofosfina-2κP}trirod(1+)

### IR-2.2.2 Nawiasy kwadratowe

#### IR-2.2.2.1 Zastosowanie we wzorach

Nawiasy kwadratowe są używane we wzorach w następujący sposób:

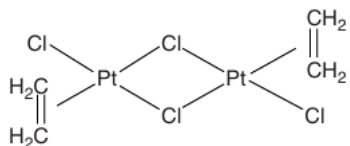
(a) Do oznaczenia całej jednostki koordynacyjnej neutralnego (formalnego) związku koordynacyjnego.

Przykłady:

1.  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  (znaczenie i sposób użycia symbolu  $\eta$  został opisany w Rozdziałach IR-9.2.4.3 i IR-10.2.5.1)
2.  $[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_2(\text{NH}_3)]$
3.  $[\text{PH}(\text{O})(\text{OH})_2]$

Żaden indeks dolny nie powinien następować po nawiasie kwadratowym użytym w tym kontekście. Na przykład jeśli wzór cząsteczkowy jest podwojeniem wzoru empirycznego, należy zaznaczyć to wewnątrz nawiasu kwadratowego.

Przykład:



4.  $[\{\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}(\mu\text{-Cl})\}_2]$  jest bardziej czytelny niż  $[\text{Pt}_2(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)_2\text{Cl}_4]$ ; zapis  $[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_2]$  jest niepoprawny.

(b) Do oznaczenia ładunku (formalnej) jednostki koordynacyjnej. W tym przypadku indeks górny pokazujący ładunek pojawia się na zewnątrz nawiasu kwadratowego, podobnie jak wszelkie indeksy dolne wskazujące na liczbę jonów w soli.

Przykłady:

5.  $[\text{BH}_4]^-$
6.  $[\text{Al}(\text{OH})(\text{OH}_2)_5]^{2+}$
7.  $[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_3]^-$
8.  $\text{Ca}[\text{AgF}_4]_2$
9.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{N}_3)]\text{SO}_4$
10.  $[\text{S}_2\text{O}_3]^{2-}$
11.  $[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$

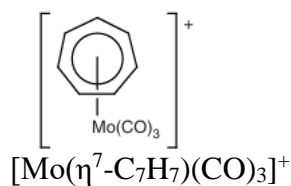
(c) W soli zawierającej zarówno kationowe, jak i anionowe jednostki koordynacyjne, każdy jon jest osobno zamknięty w nawiasach kwadratowych. Kation jest umieszczony przed anionem i nie pokazuje się ich pojedynczych ładunków. Wszelkie indeksy dolne wskazujące na liczbę kompleksów w soli są umieszczane na zewnątrz nawiasów kwadratowych.

Przykłady:

12.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6][\text{Cr}(\text{CN})_6]$  (zawiera jony  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  i  $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ )
13.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2[\text{Pt}(\text{CN})_4]_3$  (zawiera jony  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  i  $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$ )

(d) do oznaczenia wzoru strukturalnego

14.



(e) W chemii ciała stałego, do wskazania atomu lub grupy atomów w pozycji oktaedrycznej (patrz Rozdział IR-11.4.3.)

Przykład:

15.  $(\text{Mg})[\text{Cr}_2]\text{O}_4$

(f) W związkach specyficznie znakowanych (zobacz także Rozdział II-2.4.2.2 z pozycji literaturowej 2).

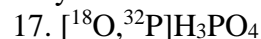
Przykład:

16.  $\text{H}_2[^{15}\text{N}]\text{NH}_2$

Należy zauważyć, że taki zapis odróżnia związek specyficznie znakowany od związku podstawionego izotopowo  $\text{H}_2^{15}\text{NNH}_2$ .

(g) W związkach selektywnie znakowanych (zobacz także Rozdział II-2.4.3.2 z Ref. 2).

Przykład:



(h) Do wskazania powtarzających się jednostek w związkach łańcuchowych.

Przykład:



### IR-2.2.2.2 Zastosowanie w nazwach

Nawiasy kwadratowe są używane *nazwach* w następujący sposób:

(a) W związkach specyficznie i selektywnie znakowanych symbol nuklidu umieszcza się w nawiasach kwadratowych przed nazwą tej części związku, która jest zmodyfikowana izotopowo (porównaj z użyciem okrągłych nawiasów w podstawionych izotopowo związkach w sekcji IR-2.2.3.2, oraz zobacz także Sekcje II-2.4.2.3, II-2.4.2.4 oraz II-2.4.3.3 z pozycji literaturowej 2)

Przykłady:

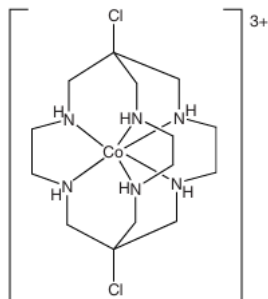
1.  $[\text{}^{15}\text{N}]\text{H}_2[\text{}^2\text{H}][\text{}^2\text{H}_1, \text{}^{15}\text{N}]\text{amoniak}$
2.  $\text{HO}[\text{}^{18}\text{O}]\text{H} [\text{}^{18}\text{O}_1]\text{nadtlenek diwodoru}$

Więcej szczegółów w sekcji II-2.4 pozycji literaturowej 2.

(b) Przy nazywaniu ligandów organicznych i części organicznych związków koordynacyjnych, użycie nawiasów kwadratowych jest zgodne z zasadami nomenklatury organicznej.<sup>1</sup>

Przykład:

3.



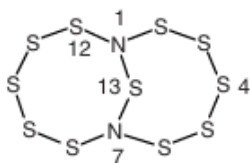
1,8-dichloro-3,6,10,13,16,19-heksaazobicyklo[6.6.6]ikozankobalt(3+)

(c) W nomenklaturze łańcuchowej i pierścieniowej nawiasy kwadratowe są używane do zamknięcia deskryptora węzłowego (Seksja IR-7.4.2 i Rozdział II-5 z pozycji literaturowej 2).

Przykłady:

4.  $\text{HSSH}^-$  1,4-dihydro-2,3-disulfylo-[4]katenian( $\bullet 1^-$ )

5.



1,7-diazyundekasulfylo-[012.1<sup>1,7</sup>]]dicykl

### IR-2.2.3 Nawiasy okrągłe

#### IR-2.2.3.1 Zastosowanie we wzorach

Nawiasy okrągłe są używane we wzorach w następujący sposób:

(a) Do zapisu wzorów grup atomów (mogą to być jony, grupy podstawnikowe, ligandy lub cząsteczki) w celu uniknięcia niejednoznaczności lub gdy grupa jest zwielokrotniana. W tym drugim przypadku liczba mnożnikowa następuje po nawiasie zamykającym. W przypadku powszechnych jonów, takich jak azotany i siarczany, nawiasy są zalecane, ale nie obowiązkowe.

Przykłady:

1.  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$
2.  $[\text{Te}(\text{N}_3)_6]$
3.  $(\text{NO}_3)^-$  lub  $\text{NO}_3^-$
4.  $[\text{FeH}(\text{H}_2)(\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PPh}_2)_2]^+$
5.  $\text{PH}(\text{O})(\text{OH})_2$
6.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{ONO})][\text{PF}_6]_2$

(b) Do zapisu skrótów nazw ligandów we wzorach (zalecane skróty ligandów podane są w Tabelach VII i VIII, zobacz także Sekcje IR-4.4.4 i IR-9.2.3.4).

Przykład:

7.  $[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$

(c) Do zapisu kropki rodnikowej w postaci wykładnika i jej mnożnika dla polirodników, aby uniknąć niejednoznaczności w stosunku do oznaczenia ładunku.

Przykład:

8.  $\text{NO}^{(2\bullet)-}$

(d) W chemii ciała stałego do zapisu symboli atomów zajmujących losowo to samo położenie w sieci krystalicznej. Symbole są oddzielone przecinkiem, bez spacji.

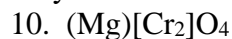
Przykład:

9.  $\text{K}(\text{Br},\text{Cl})$



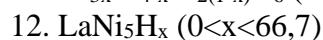
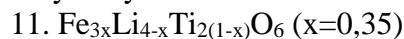
(e) W chemii ciała stałego, do wskazania atom lub grupy atomów w położeniu tetraedrycznym.

Przykład:



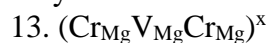
(f) Do wskazania skład związku niestechiometrycznego.

Przykłady:



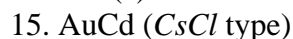
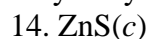
(g) W notacji Krögera-Vinka (patrz sekcja IR-11.4) do wskazania defektu kompleksowego.

Przykład:



(h) Dla substancji krystalicznych, do wskazania typu utworzonego kryształu (patrz. Rozdział IR-11).

Przykłady:



(i) Do zapisu symbolu stanu skupienia substancji chemicznej.

Przykład:



(j) W związkach optycznie czynnych do zapisu znaków skręcalności.

Przykład:



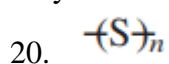
(k) Do zapisu deskryptorów stereochemicznych, takich jak deskryptory chiralności i indeksy konfiguracyjne (patrz sekcja IR-9.3.3.2).

Przykłady:



(l) W polimerach jednostka powtarzalna jest zaznaczona w nawiasach z przekreśleniem, gdzie kreska nałożona na nawiasy reprezentuje wiązanie.<sup>3</sup>

Przykład:



IR-2.2.3.2 Zastosowanie w nazwach

Nawiasy okrągłe w nazwach stosuje się w następujący sposób:

(a) Do zapisu nazw grup podstawnikowych lub ligandów w celu uniknięcia niejednoznaczności, na przykład gdy nazwy grup podstawnikowych bądź ligandów zawierają przedrostki zwielokrotniające, takie jak (dioksydo) lub (trifosfato), lub gdy wzorce podstawienia nie byłyby w przeciwnym razie jednoznacznie określone, lub gdy nazwa grupy podstawnikowej bądź ligandu zawiera deskryptory liczbowe lub literowe. Jeśli nazwy ligandów lub grup podstawnikowych same zawierają nawiasy okrągłe konieczne jest użycie różnych nawiasów - zgodnie z regułami z Sekcji IR-2.2.1.

Przykłady:

1.  $[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_3]^-$  trichlorido( $\eta^2$ -eteno)platynian(II)
2.  $[\text{Hg}(\text{CHCl}_2)\text{Ph}]$  (dichlorometylo)(fenylo)rtęć

(b) Po przedrostkach zwielokrotniających z serii bis, tris itd., chyba że należy użyć innych znaków zamykających ze względu na kolejność stosowania nawiasów (patrz Sekcja IR-2.2.1)

Przykłady:

3.  $[\text{CuCl}_2(\text{NH}_2\text{Me})_2]$  dichloridobis(metylolamina)miedź(II)
4.  $\text{Fe}_2\text{S}_3$  tris(siarczek) diżelaza

(c) Do zapisu liczb określających stopień utlenienia i ładunek.

Przykład:

5.  $\text{Na}[\text{B}(\text{NO}_3)_4]$  tetrazotanoboran(III) sodu lub tetraazotanoboran(1-) sodu

(d) Dla rodników, do zapisu kropki rodnikowej oraz, jeśli to właściwe, wartości ładunku.

Przykłady:

6.  $\text{ClOO}^\bullet$  chloridoditlen( $\bullet$ )
7.  $\text{Cl}_2^{\bullet-}$  dichlorek( $\bullet 1-$ )

(e) Do zapisu stosunków stechiometrycznych w formalnych związkach addycyjnych.

Przykład:

8.  $8\text{H}_2\text{S}\cdot 46\text{H}_2\text{O}$  siarczek wodoru– woda (8/46)

(f) Do zapisu liter pisanych kursywą oznaczających wiązania między dwoma (lub więcej) atomami metali w związkach koordynacyjnych.

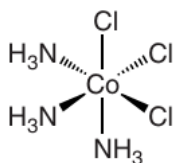
Przykład:

9.  $[\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}]$  bis(pentakarbonylomangan)(*Mn–Mn*)

(g) Do zapisu deskryptorów stereochemicznych (patrz Sekcja IR-9.3)

Przykłady:

- 10.



[CoCl<sub>3</sub>(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>](OC-6-22)-triaminatrichloridokobalt(III)

11. (+)<sub>589</sub>-[Co(en)<sub>3</sub>]Cl<sub>3</sub> trichlorek (+)<sub>589</sub>-tris(etano-1,2-diamina)kobaltu(III)

12.

1 2 3 4 5  
(2*R*,3*S*)-ClSiH<sub>2</sub>SiHClSiHClSiH<sub>2</sub>SiH<sub>3</sub> (2*R*,3*S*)-1,2,3-trichloropentasilan

(h) W związkach podstawionych izotopowo odpowiedni symbol (lub symbole) nuklidu umieszcza się w nawiasach okrągłych przed nazwą tej części związku, która jest podstawiona izotopowo (patrz Sekcja II-2.3.3 w pozycji literaturowej 2). Porównaj z użyciem nawiasów kwadratowych dla związków znakowanych specyficznie i selektywnie w Sekcji IR-2.2.2.2(a).

Przykłady:

13. H<sup>3</sup>HO (<sup>3</sup>H<sub>1</sub>)woda

(i) Do zapisu liczby atomów wodoru w związkach boru.

Przykłady:

14. B<sub>6</sub>H<sub>10</sub> heksaboran(10)

(j) W nazwach wodorowych (Sekcja IR-8.4), do zapisu części nazwy następującej po słowie wodoro.

Przykład:

15. [HMO<sub>6</sub>O<sub>19</sub>]<sup>-</sup> wodoro(nonadekaoksidoheksamolibdenian)(1-)

#### IR-2.2.4 Nawiasy klamrowe

Nawiasy klamrowe stosuje się w nazwach i wzorach zgodnie z hierarchiczną kolejnością przedstawioną i zilustrowaną przykładami w Sekcji IR-2.2.1.

### IR-2.3 ŁĄCZNIKI, ZNAKI PLUS I MINUS, MYŚLNIK ORAZ WSKAŹNIKI WIAZAŃ

#### IR-2.3.1 Łączniki

Łączniki są używane we wzorach i nazwach. Należy pamiętać, że nie stosuje się spacji po żadnej ze stron łącznika.

(a) Do oddzielania symboli takich jak μ (mu), η (eta) i κ (kappa) od reszty wzoru lub nazwy.

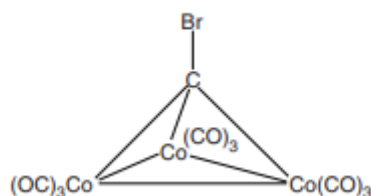
Przykład:

1. [{Cr(NH<sub>3</sub>)<sub>5</sub>]<sub>2</sub>{μ-OH}]<sup>5+</sup> μ-hydroksido-bis(pentaaminachrom)(5+)

(b) Do oddzielania geometrycznych lub strukturalnych i stereochemicznych deskryptorów, takich jak *cyklo*, *katena*, *triangulo*, *kwadro*, *tetraedro*, *oktaedro*, *kloso*, *nido*, *arachno*, *cis* i *trans* od reszty wzoru lub nazwy. Przy opisywaniu agregatów lub klastrów, deskryptory lokantów są oddzielane w podobny sposób.

Przykład:

2.



$\mu_3$ -(bromometanetriyl)-*cyklo*-tris(trikarbonylokobalt)(3 Co—Co)

(c) Do oddzielania deskryptorów lokantów od reszty nazwy.

Przykład:

3.  $\text{SiH}_2\text{ClSiHClSiH}_2\text{Cl}$       1,2,3-trichlorotrikrzemian

(d) Do oddzielania symbolu nuklidu znakującego od jego lokantu we wzorze związku selektywnie znakowanego.

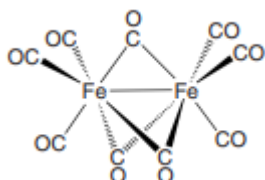
Przykład:

$[1\text{-}^2\text{H}_{1,2}]\text{SiH}_3\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$

(e) Do oddzielenia nazwy ligandów mostkujących od reszty nazwy.

Przykład:

5.



$[\text{Fe}_2(\mu\text{-CO})_3(\text{CO})_6]$     tri- $\mu$ -karbonylo-bis(trikarbonyloželazo)(Fe—Fe)

### IR-2.3.2 Znaki plus i minus

Znaki + oraz – są używane do oznaczania ładunku jonu we wzorze lub nazwie.

Przykłady:

1.  $\text{Cl}^-$

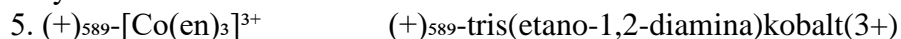
2.  $\text{Fe}^{3+}$

3.  $[\text{SO}_4]^{2-}$

4.  $[\text{Co}(\text{CO})_4]^-$       tetrakarbonylokobaltan(1-)

Znaki te mogą również wskazywać znak skręcalności optycznej we wzorze lub nazwie związku optycznie czynnego.

Przykład:



### IR-2.3.3 Myślniki

Myślniki są używane we wzorach tylko wtedy, gdy wzory są strukturalne (mniej precyzyjny termin "długie kreski" był używany w pozycji literaturowej 4)

Myślniki są używane w *nazwach* na dwa sposoby:

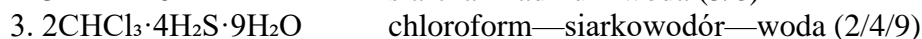
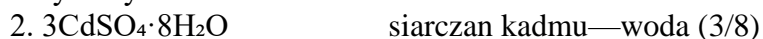
(a) Do wskazywania wiązań metal-metal w związkach wielordzeniowych. Oddzielają one zapisane kursywą symbole metali tworzących wiązanie, które są zawarte w nawiasach na końcu nazwy.

Przykład:





(b) Do oddzielania poszczególnych składników w nazwach związków addycyjnych (formalnych).

Przykłady:

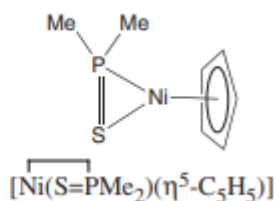


### IR-2.3.4 Specjalne wskaźniki wiązań dla wzorów liniowych

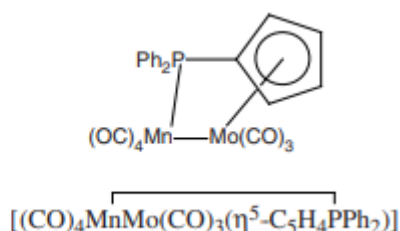
Symbole strukturalne  i  mogą być używane we wzorach liniowych do wskazywania wiązań między niesąsiadującymi symbolami atomów.

Przykłady:

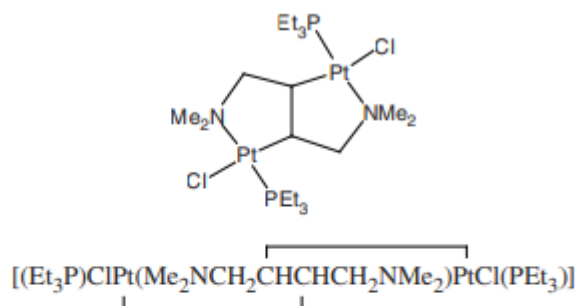
1.



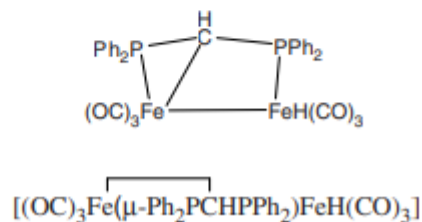
2.



3.



4.



## IR-2.4 UKOŚNIK

Ukośnik (/) jest używany w nazwach związków addycyjnych do rozdzielania liczb arabskich wskazujących proporcje poszczególnych składników w związku.

Przykłady:

1.  $BF_3 \cdot 2H_2O$  - trifluorek boru—woda (1/2)
2.  $BiCl_3 \cdot 3PCl_5$  - trichlorek bizmutu — pentachlorek fosforu (1/3)

## IR-2.5 KROPKI, DWUKROPKI, PRZECINKI I ŚREDNIKI

### IR-2.5.1 Kropki

Kropki są używane we wzorach w różnych pozycjach:

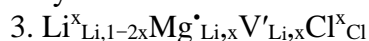
(a) Jako prawe indeksy górne wskazują niesparowane elektrony w rodnikach (patrz Sekcja IR-4.6.2).

Przykłady:

1.  $HO^\bullet$
2.  $O_2^{2\bullet}$

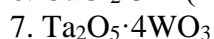
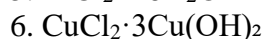
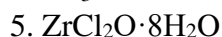
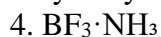
(b) Jako prawe indeksy górne w notacji Krügera-Vinka w chemii ciała stałego wskazują jednostkę efektywnego ładunku dodatniego (patrz Sekcja IR-11.4.4).

Przykład:



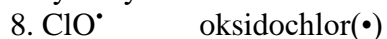
(c) Kropki środkowe oddzielają poszczególne składniki we wzorach związków addycyjnych (formalnych), tj. związków uwodnionych, adduktów, klatratów, soli podwójnych i tlenków podwójnych. Kropka jest zapisywana na środku linii, aby odróżnić ją od kropki oznaczającej koniec zdania.

Przykłady:



(d) Kropki są stosowane w nazwach rodników w celu wskazania niesparowanego elektronu

Przykłady:

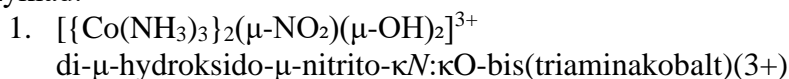


### IR-2.5.2 Dwukropki

Dwukropki są używane w nazwach w następujący sposób:

(a) W związkach koordynacyjnych i metaloorganicznych do oddzielania atomów wiążących liganda, który mostkuje atomy centralne.

Przykład:



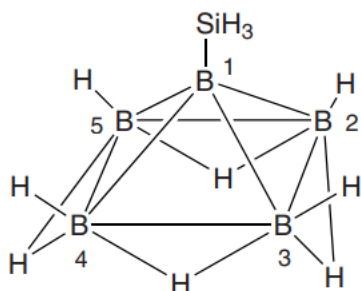
(Więcej informacji o użyciu  $\kappa$  można znaleźć w sekcjach IR-9.2.4.2 i IR-10.2.3.3, a o użyciu  $\mu$  w sekcjach IR-9.2.5.2 i IR-10.2.3.1)

(b) W wielordzeniowych związkach koordynacyjnych i metaloorganicznych do oddzielania położenia atomów centralnych, gdy pojedyncze atomy wiążące lub grupy nienasycone wiążą się z dwoma lub więcej atomami centralnymi. Na przykład ligand chlorkowy mostkujący atomy centralne 1 i 2 byłby oznaczony jako  $\mu\text{-chlorido-1:2}\kappa^2\text{Cl}$ , a grupa karbonylowa terminalnie związana z atomem 1 i mostkująca atomy 2 i 3 przez swoje elektrony  $\pi$  byłaby oznaczona jako  $\mu\text{-}2\eta^2:3\eta^2\text{-karbonylo-1}\kappa\text{C}$ .

(c) W związkach boru do oddzielania zestawów lokantów atomów boru, które są połączone przez mostkujące atomy wodoru.

Przykład:

2.



1-silylo-2:3:2,5:3,4:4,5-tetra- $\mu H$ -pentaboran(9)

(d) W nomenklaturze łańcuchów i pierścieni do oddzielania deskryptorów węzłowych poszczególnych modułów zespołu (patrz Sekcja IR-7.4.2).

### IR-2.5.3 Przecinki

Przecinki są używane w następujący sposób:

(a) Do rozdzielania lokantów.

Przykład:

1.  $\text{SiH}_2\text{ClSiHClSiH}_2\text{Cl}$       1,2,3-trichlorotrikrzemian

(b) Do rozdzielania symboli atomów wiążących w ligandzie wielodentyczny.

Przykład:

2. *cis*-bis(glicyniano- $\kappa N, \kappa O$ )platyna

(c) W chemii ciała stałego do rozdzielania symboli atomów zajmujących losowo to samo położenie.

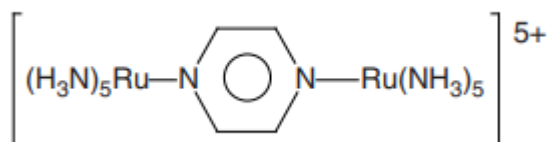
Przykład:

3.  $(\text{Mo}, \text{W})_n\text{O}_{3n-1}$

(d) Do rozdzielania liczb utlenienia w związku o mieszanej wartościowości.

Przykład:

4.



$[(\text{H}_3\text{N})_5\text{Ru}(\mu\text{-pyz})\text{Ru}(\text{NH}_3)_5]^{5+}$

kation  $\mu$ -pirazyna-bis(pentaaminarutenu)(II,III)

(e) Do rozdzielania symboli atomów znakowanych w związkach selektywnie znakowanych (patrz Sekcja II-2.4.3.3 z Ref. 2).

Przykład:

5.  $[\text{}^{18}\text{O}, \text{}^{32}\text{P}]\text{H}_3\text{PO}_4$       kwas  $[\text{}^{18}\text{O}, \text{}^{32}\text{P}]$ fosforowy

### IR-2.5.4 Średniki

Średniki są używane w następujący sposób:

(a) W nazwach związków koordynacyjnych do porządkowania lokantów już rozdzielonych przecinkami, jak na przykład w konwencji kappa. (Zobacz przykłady w Sekcji IR-9.2.5.6.)



(b) Do rozdzielania indeksów dolnych wskazujących możliwe liczby nuklidów znakujących w związkach selektywnie znakowanych.

Przykład:



## IR-2.6 SPACJE

Spacje nigdy nie są używane we wzorach. W nomenklaturze nieorganicznej są używane w nazwach w następujący sposób:

(a) Do rozdzielania nazw jonów w solach.

Przykłady:

1. NaCl            chlorek sodu
2. NaTl(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>    diazotan(V) sodu talu(I)

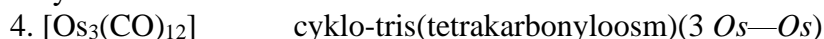
(b) W nazwach związków binarnych do rozdzielania części elektroujemnej od elektrododatniej.

Przykład:



(c) Do oddzielania liczebników arabskich od symboli atomów centralnych w deskrytorze wiązania w nazwie jednostki wielojądrowej z kilkoma wiązaniami bezpośrednimi między atomami centralnymi.

Przykład:



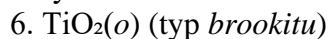
(d) W nazwach związków addycyjnych (formalnych), do oddzielania deskrytorów stechiometrycznych od pozostałej części nazwy.

Przykład:



(e) W nomenklaturze związków stałych, do oddzielania wzoru od typu struktury.

Przykład:



## IR-2.7 ELIZJE

Zasada ogólna: w nomenklaturze składnikowej i addytywnej nie stosuje się elizji przy używaniu przedrostków zwielokrotniających.

Przykłady:

1. tetraakwa (*nie* tetrakwa)
2. tetraarsenowy heksatlenek (*nie* tetrarsenowy)
3. trójjądrowy (*nie* trójjądrowy)

## IR-2.8 LICZEBNIKI

### IR-2.8.1 Liczebniki arabskie

Liczebniki arabskie mają kluczowe znaczenie w nomenklaturze; ich umiejscowienie we wzorze lub nazwie jest szczególnie istotne.

Liczebniki są używane we *wzorach* na wiele sposobów:

(a) Jako indeksy dolne prawostronne, wskazujące na liczbę poszczególnych składników (atomów lub grup atomów). Jedyńki są pomijane.

Przykłady:

1.  $\text{CaCl}_2$
2.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_3]\text{Cl}_3$

(b) Jako indeksy górne prawostronne, wskazujące na ładunek. Jedyńki są pomijane.

Przykłady:

3.  $\text{Cl}^-$
4.  $\text{NO}^+$
5.  $\text{Cu}^{2+}$
6.  $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$

(c) Do oznaczania składu związków addycyjnych (formalnych) lub związków niestechiometrycznych. Liczebnik jest zapisywany w linii przed wzorem każdego składnika, z wyjątkiem jedyńki, którą się pomija.

Przykłady:

7.  $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
8.  $8\text{WO}_3 \cdot 9\text{Nb}_2\text{O}_5$

(d) Do oznaczania liczby masowej i/lub liczby atomowej nuklidów reprezentowanych przez ich symbole. Liczba masowa jest zapisywana jako indeks górny z lewej strony, a liczba atomowa jako indeks dolny z lewej strony.

Przykłady:

9.  $^{18}_8\text{O}$
10.  $^3_1\text{H}$

(e) Jako indeks górny z prawej strony przy symbolu  $\eta$ , aby wskazać haptyczność ligandu (patrz Sekcje IR-9.2.4.3 i IR-10.2.5.1). Jako indeks dolny z prawej strony przy symbolu  $\mu$ , aby wskazać krotność mostkowania ligandu (patrz Sekcja IR-9.2.5.2).

Przykład:

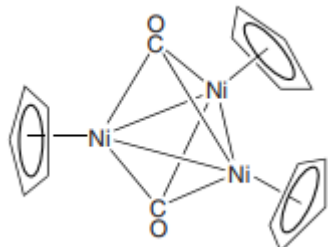
11.  $[\{\text{Ni}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\}_3(\mu_3\text{-CO})_2]$

Liczebniki arabskie są również używane jako lokanty w *nazwach* (patrz Sekcja IR-2.14.2) oraz w następujący sposób:

(a) Do zapisu liczby wiązań metal-metal w związkach wielojądrowych.

Przykład:

12.



di- $\mu_3$ -karbonylo-cyklo-tris(cyklopentadienylonikiel)(3 Ni—Ni)

(b) Do zapisu ładunku.

Przykłady:

13.  $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$  kation pentaaminachloridokobaltu(2+)

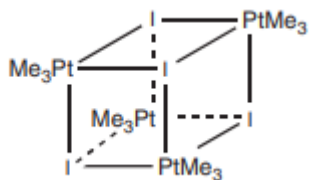
14.  $[\text{AlCl}_4]^-$  tetrachloroglinian(1-)

Należy zauważyć, że liczba „1” musi być uwzględniona w celu uniknięcia niejednoznaczności w odniesieniu do symboli rotacji optycznej (patrz Sekcja IR-2.2.3.1(j)).

(c) Jako indeks dolny z prawej strony przy symbolu  $\mu$ , aby wskazać krotność mostkowania ligandu (patrz Sekcja IR-9.2.5.2).

Przykłady:

15.



$[\{\text{Pt}(\mu_3\text{-I})\text{Me}_3\}_4]$  tetra- $\mu_3$ -jodido-tetrakis[trimetyloplatyna(IV)]

(d) W nomenklaturze związków boru (patrz Rozdział IR-6.2.3), do zapisu liczby atomów wodoru w macierzystej cząsteczce boranu. Liczebnik arabski jest umieszczony w okrągłych nawiasach bezpośrednio po nazwie.

Przykłady:

16.  $\text{B}_2\text{H}_6$  diboran(6)

17.  $\text{B}_{10}\text{H}_{14}$  dekaboran(14)

(e) Jako indeks górny z prawej strony przy symbolu  $\kappa$ , do zapisu liczby atomów donorowych określonego typu związanych z atomem centralnym lub atomami centralnymi (patrz Sekcje IR-9.2.4.2 i IR-10.2.3.3).

(f) Jako indeks górny z prawej strony przy symbolu  $\eta$ , do zapisu haptyczności ligandu (Patrz Sekcje IR-9.2.4.3 i IR-10.2.5.1).

(g) W strukturach wielojądrowych liczebniki arabskie są częścią deskryptora CEP<sup>5</sup> używanego do identyfikacji kształtów wielościanów (Patrz także Sekcja IR-9.2.5.6).

(h) W deskrypcie stechiometrycznym kończącym nazwę związku addycyjnego (formalnego) (patrz Sekcja IR-5.5).

Przykład:

18. 8H<sub>2</sub>S·46H<sub>2</sub>O siarkowodór—woda (8/46)

(i) Jako indeks górny z prawej strony, do zapisu niestandardowej liczby wiązań w konwencji λ (Patrz Sekcja IR-6.2.1.1).

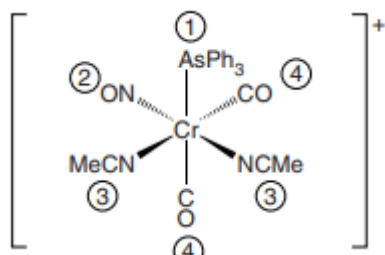
Przykład:

19. IH<sub>5</sub> λ<sup>5</sup>-jodan

(j) Do opisu geometrii koordynacyjnej i konfiguracji ligandów wokół atomu centralnego przy użyciu symboli wielościanów i indeksów konfiguracyjnych (patrz Sekcje IR-9.3.2 i IR-9.3.3).

Przykład:

20.



kation (OC-6-43)-bis(acetonitryl)dikarbonylnitrozylo(trifenylarseno)chromu(1+)

### IR-2.8.2 Liczebniki rzymskie

Liczebniki rzymskie są używane we *wzorach* jako indeksy górne z prawej strony do oznaczania formalnego stopnia utlenienia.

Przykłady:

1. [Co<sup>II</sup>Co<sup>III</sup>W<sub>12</sub>O<sub>42</sub>]<sup>7-</sup>
2. [Mn<sup>VII</sup>O<sub>4</sub>]<sup>-</sup>
3. Fe<sup>II</sup>Fe<sup>III</sup><sub>2</sub>O<sub>4</sub>

W *nazwach* wskazują one formalny stopień utlenienia atomu i są umieszczane w nawiasach bezpośrednio po nazwie kwalifikowanego atomu.

Przykłady:

4. [Fe(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>]<sup>2+</sup> kation heksaakwazelaza(II)
5. [FeO<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> tetraoksożelazian(VI)

## IR-2.9 LITERY PISANE KURSYWĄ

Litery pisane kursywą są używane w nazwach w następujących przypadkach:

(a) Dla przedrostków geometrycznych i strukturalnych, takich jak *cis*, *cyklo*, *katena*, *triangulo*, *nido*, itd. (patrz Tabela V).

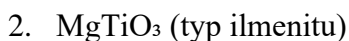
(b) Do oznaczania symboli atomów centralnych w deskrytorze wiązań w związkach wielojądrowych.

Przykład:



(c) W tlenkach i wodorotlenkach podwójnych, gdy należy wskazać typ strukturalny.

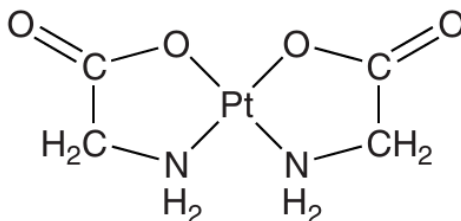
Przykład:



(d) W związkach koordynacyjnych, do oznaczenia symboli atomu lub atomów liganda (zazwyczaj wielokleszczowego), z którym związany jest atom centralny, niezależnie od tego, czy stosowana jest konwencja kappa czy nie. (Patrz Sekcja IR-9.2.4.4.)

Przykład:

3.



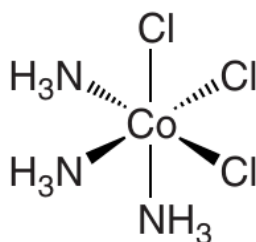
*cis*-bis(glicyniano- $\kappa\text{N}, \kappa\text{O}$ )platyna

(e) W chemii ciała stałego, w symbolach Pearsona i symbolach układów krystalicznych. (Patrz Sekcje IR-3.4.4 i IR-11.5.)

(f) Wielkie litery pisane kursywą są używane w symbolach wielościanów. (Patrz Sekcja IR-9.3.2.1.)

Przykład:

4.



[CoCl<sub>3</sub>(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] (OC-6-22)-triamminotrichlorokobalt(III)

(g) Inne zastosowania wielkich liter pisanych kursywą to lokanty w nomenklaturze podstawnikowej (patrz np. Sekcja IR-6.2.4.1) oraz litera H dla wskazanego wodoru (patrz np. Sekcja IR-6.2.3.4). Małe litery pisane kursywą są używane do reprezentowania liczb, szczególnie we wzorach, gdzie liczby są nieokreślone.

Przykłady:

5. (HBO<sub>2</sub>)<sub>n</sub>

6. Fe<sup>n+</sup>

### IR-2.10 ALFABET GRECKI

Litery greckie (w zapisie łacińskim) są używane w systematycznej nomenklaturze nieorganicznej w następujący sposób:

Δ do oznaczania konfiguracji absolutnej lub jako deskryptor strukturalny do oznaczania deltahedrów (patrz Sekcja IR-9.3.4);

δ do oznaczania konfiguracji absolutnej konformacji pierścieni chelatowych (patrz Sekcja IR-9.3.4); w chemii ciała stałego do wskazywania małych zmian w składzie (patrz Sekcja IR-11.3.2); do oznaczania skumulowanych wiązań podwójnych w pierścieniach lub układach pierścieni (patrz Sekcja P-25.7 Ref. 1);

η do oznaczania hapticytości liganda (patrz Sekcje IR-9.2.4.3 i IR-10.2.5.1);

κ jako deskryptor atomu wiążącego w konwencji kappa (patrz Sekcje IR-9.2.4.2 i IR-10.2.3.3);

Λ do oznaczania konfiguracji absolutnej (patrz Sekcja IR-9.3.4);

λ do wskazywania niestandardowej liczby wiązań w konwencji lambda (patrz Sekcja IR-6.2.1 i Sekcja P-14.1 Ref.1); do oznaczania konfiguracji absolutnej konformacji pierścieni chelatowych (patrz Sekcja IR-9.3.4);

μ do oznaczania liganda mostkującego (patrz Sekcje IR-9.2.5.2 i IR-10.2.3.1).

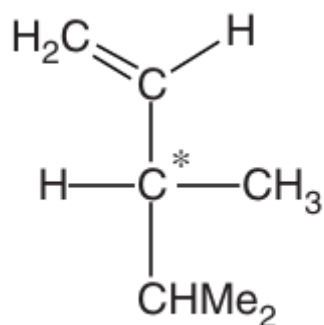
### IR-2.11 GWIAZDKI

Gwiazdka (\*) jest używana we wzorach jako prawy indeks górny przy symbolu pierwiastka w następujących przypadkach:

(a) Do zaznaczenia centrum chiralnego.

Przykład:

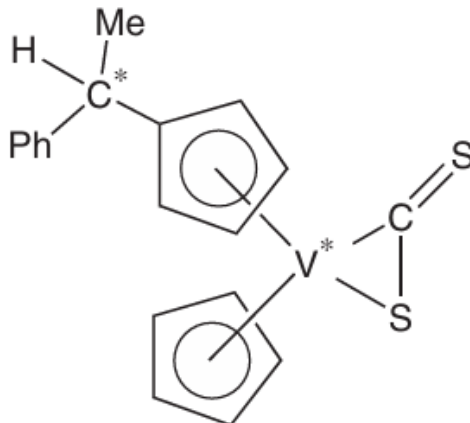
1.



To zastosowanie zostało rozszerzone na oznaczanie chiralnego liganda lub centrum chiralnego w chemii koordynacyjnej.

Przykład:

2.



(b) Do oznaczenia wzbudzonych stanów cząsteczkowych lub jądrowych.

Przykład:

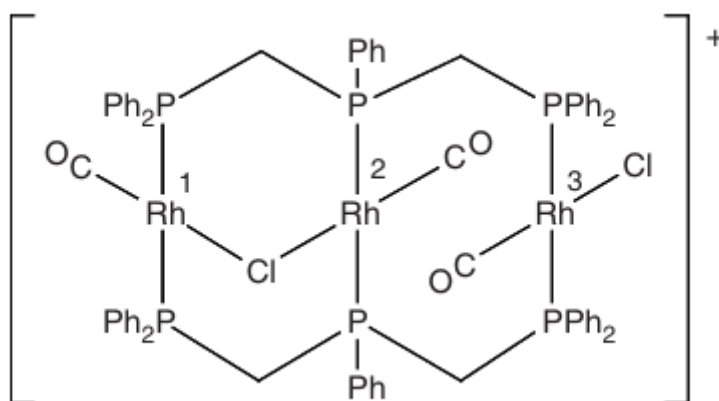
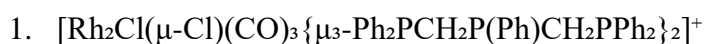
3. NO\*

### IR-2.12 PRIMESY

(a) Primesy ('), podwójne primesy (''), potrójne primesy ('''') itd. mogą być używane w nazwach i wzorach związków koordynacyjnych w następujący sposób:

- (i) w nazwach ligandów, w celu rozróżnienia między miejscami podstawienia;
- (ii) przy określaniu atomów donorowych (IR-9.2.4.2), w celu rozróżnienia między atomami donorowymi;
- (iii) przy określaniu konfiguracji za pomocą indeksów konfiguracyjnych (IR-9.3.5.3), w celu rozróżnienia między atomami donorowymi o tym samym priorytecie, w zależności od tego, czy znajdują się w obrębie tego samego liganda lub części liganda.

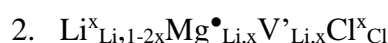
Przykład:



trikarbonylo-1κC,2κC,3κC-μ-chlorido-1:2κ<sup>2</sup>Cl-chlorido-3κCl-bis[μ<sub>3</sub>-bis[(difenylfosfanylo)metylo]-1κP:3κP'-fenylofosfan-2κP]trirod(1+)

(b) Primesy, podwójne primesy, potrójne primesy itd. są również używane jako prawe indeksy górne w notacji Krögera-Vinka (patrz Sekcja IR-11.4), gdzie oznaczają miejsce posiadające odpowiednio jeden, dwa, trzy itd. jednostki efektywnego ładunku ujemnego.

Przykład:



## IR-2.13 PRZEDROSTKI MULTIPLIKATYWNE

Liczba identycznych jednostek chemicznych w nazwie jest wyrażana za pomocą przedrostka multiplikatywnego (patrz Tabela IV).

W przypadku prostych jednostek, takich jak ligandy monoatomowe, używane są przedrostki multiplikatywne: di, tri, tetra, penta, itd.

Przedrostki multiplikatywne bis, tris, tetrakis, pentakis itd. są używane z nazwami ligandów złożonych lub w celu uniknięcia niejednoznaczności. Zmodyfikowana jednostka jest umieszczana w nawiasach.

Przykłady:

- |   |                                       |
|---|---------------------------------------|
| 1. $\text{Fe}_2\text{O}_3$                  | ditlenek żelaza                       |
| 2. $[\text{PtCl}_4]^{2-}$                   | tetrachloroplatynian(2-)              |
| 3. $[\text{Fe}(\text{CPh})_2(\text{CO})_4]$ | tetrakarbonylobis(fenylotynylo)żelazo |



- |                    |  |
|--------------------|--|
| 4. $TlI_3$         | trijodek talu (por. Sekcja IR-5.4.2.3) |
| 5. $Ca_3(PO_4)_2$  | bis(fosforan) triwapnia                |
| 6. $[Pt(PPh_3)_4]$ | tetrakis(trifenylfosfina)platyna(0)    |

Złożone przedrostki multiplikatywne są tworzone przez cytowanie jednostek, dziesiątek, setek itd., np. 35 jest zapisywane jako pentatriaconta (lub pentatriacontakis).

## IR-2.14 LOKANTY

### IR-2.14.1 Wprowadzenie

Lokanty są używane do wskazywania położenia podstawnika lub cechy strukturalnej w cząsteczce macierzystej. Lokantami mogą być cyfry arabskie lub litery.

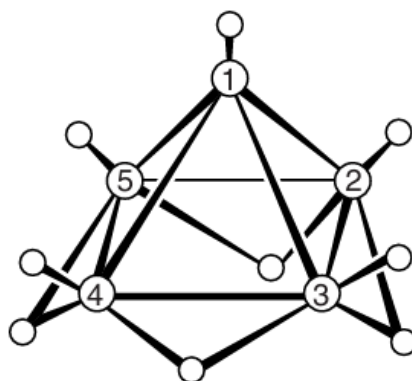
### IR-2.14.2 Cyfry arabskie

Cyfry arabskie są używane jako lokanty w następujący sposób:

(a) Do numerowania szkieletowych atomów w macierzystych wodorkach w celu wskazania: położenia atomów wodoru, gdy występują niestandardowe liczby wiązań; nienasycenia; położenia mostkujących atomów wodoru w strukturze boranu.

Przykłady:

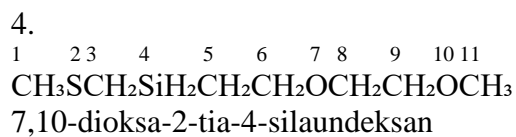
- |                    |   |
|--------------------|---|
| 1. $H_5SSSH_4SH$   | $1\lambda^6, 3\lambda^6$ -tetrasulfan (nie $2\lambda^6, 4\lambda^6$ ) |
| 2. $H_2NN=NHNNH_2$ | pentaaz-2-en  |
| 3.                 |   |



2,3:2,5:3,4:4,5-tetra- $\mu$ H-nido-pentaboran(9)

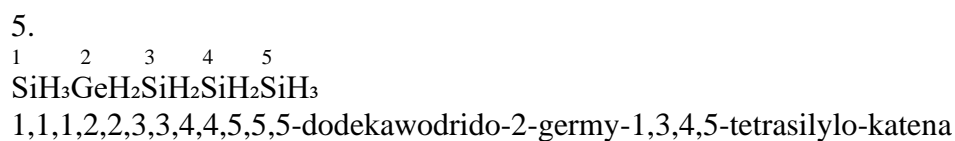
(b) W nomenklaturze podstawnikowej.

Przykład:



(c) W nomenklaturze addytywnej.

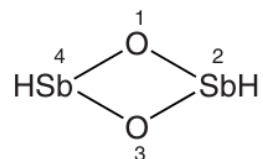
Przykład:



(d) W nomenklaturze Hantzsch-Widmana (Sekcja IR-6.2.4.3), do wskazania położenia atomów szkieletowych.

Przykład:

6.

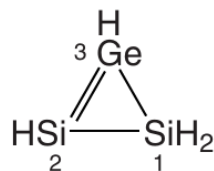


1,3,2,4-dioksadistibetan

(e) W nomenklaturze Hantzsch-Widmana (Sekcja IR-6.2.4.3), do oznaczania wskazanego wodoru.

Przykład:

7.

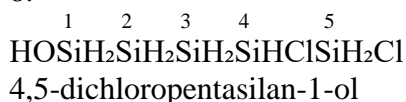


1H-1,2,3-disilagermiren

(f) W nomenklaturze podstawnikowej, do określenia położenia grup podstawnikowych.

Przykład:

8.



(g) W nomenklaturze podstawnikowej, do określenia atomu szkieletowego, na którym wykonywana jest operacja addytywna lub subtraktywna.

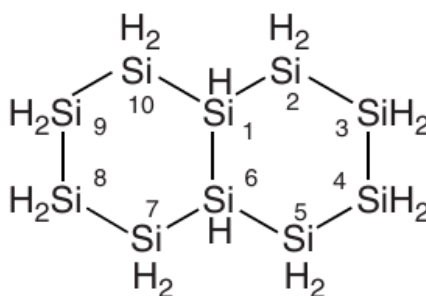
Przykład:



(h) W nazwach von Baeyera, do wskazania topologii układu pierścieni policyklicznych.

Przykład:

10.



bicyklo[4.4.0]dekasilan

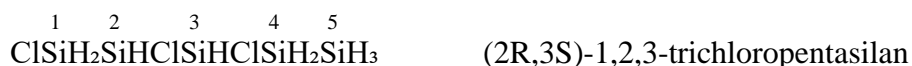
(i) W związkach koordynacyjnych wielordzeniowych, do numerowania atomów centralnych (patrz Sekcja IR-9.2.5).

Przykład 11



(j) Aby wskazać stereochemię przy poszczególnych atomach w strukturach, w których użyto numeracji arabskiej do numerowania tych atomów.

Przykład 12



### IR-2.14.3 Lokanty literowe

Wielkie litery zapisane kursywą stosuje się jako lokanty w niektórych nazwach podstawnikowych. (Zobacz na przykład Sekcję IR-6.2.4.1.)

Małe litery są używane w nomenklaturze poliokso-metalanów do oznaczenia wierzchołków wielościanów koordynacyjnych wokół atomów centralnych. Są one dołączane do numeru

atomu centralnego, do którego odnosi się dany wierzchołek. Szczegółowe omówienie znajduje się w Rozdziale II-1 pozycji 2.

## IR-2.15 ZASADY KOLEJNOŚCI

### IR-2.15.1 Wprowadzenie

Nomenklatura chemiczna zajmuje się nazwami pierwiastków i ich połączeń. O ile zapisywanie symbolu lub nazwy pierwiastka jest proste, o tyle wybór, który pierwiastek zapisać jako pierwszy we wzorze i nazwie, musi zostać dokonany, gdy tylko pierwiastek łączy się z jednym lub więcej innymi pierwiastkami tworząc, na przykład, związek dwuskładnikowy. Kolejność wymieniania pierwiastków we wzorach i nazwach opiera się na metodach opisanych poniżej. Ponadto, grupy atomów, takie jak jony, ligandy w związkach koordynacyjnych i grupy podstawnikowe w pochodnych macierzystych wodorków, są uporządkowane według określonych reguł.

### IR-2.15.2 Kolejność alfabetyczna

Kolejność alfabetyczna jest stosowana we wzorach w następujący sposób:

a) W obrębie grupy kationów oraz w obrębie grupy anionów, odpowiednio, we wzorach soli i soli podwójnych. Odstępstwa od tej reguły mogą być dopuszczalne, jeśli pożądane jest przekazanie określonych informacji strukturalnych, jak w przykładzie 5 poniżej.

Przykłady:

1.  $\text{BiClO}$  (aniony  $\text{Cl}^-$  i  $\text{O}^{2-}$ )
2.  $\text{NaOCl}$  (anion  $\text{OCl}^-$ , por. Sekcja IR-4.4.3.1)
3.  $\text{KNa}_4\text{Cl}(\text{SO}_4)_2$
4.  $\text{CaTiO}_3$  (typ perowskitu)
5.  $\text{SrFeO}_3$  (typ perowskitu)

(b) We wzorach związków koordynacyjnych oraz związków formalnie traktowanych jako związki koordynacyjne, ligandy są wymieniane w kolejności alfabetycznej według ich wzorów lub skrótów. (Patrz Sekcja IR-2.15.3.4) Jeśli to możliwe, symbol atomu donorowego w wzorach ligandów powinien być umieszczony najbliżej symbolu atomu centralnego, z którym jest skoordynowany. (Patrz Sekcja IR-9.2.3.1.)

Przykłady:

6.  $[\text{CrCl}_3(\text{NH}_3)_2(\text{OH}_2)_2]$

(c) Przy konstruowaniu wzoru dla związku addycyjnego (formalnego), wzory poszczególnych składników są uporządkowane najpierw według liczby każdego składnika, a następnie alfabetycznie. (Patrz Sekcja IR-4.4.3.5.)

Kolejność alfabetyczna jest używana w nazwach w następujący sposób:

(d) W nazwach składu, nazwy składników formalnie elektropozytywnych i nazwy składników formalnie elektroujemnych są ułożone alfabetycznie, przy czym pierwsza grupa składników poprzedza drugą. Należy zauważyć, że ta kolejność składników może zatem odbiegać od kolejności odpowiadających składników we wzorze, jak w Przykładach 7, 9 i 10 poniżej.

Przykłady:

7.  $\text{KMgF}_3$  fluorek magnezu potasu
8.  $\text{BiClO}$  tlenek chlorku bizmutu
9.  $\text{ZnI(OH)}$  wodorotlenek jodku cynku
10.  $\text{SrFeO}_3$  tlenek żelaza strontu (por. Przykład 5 powyżej)

(e) W cytowaniu ligandów w nazwach addytywnych. Alfabetyczna kolejność nazw ligandów jest zachowana niezależnie od liczby każdego liganda lub tego, czy związki są jednojądrowe czy wielojądrowe (por. Sekcja IR-2.15.3.4).

Przykłady:

11.  $\text{K[AuS(S}_2)]$  potas [(disulfido)sulfidozłocian(1-)]
12.  $[\text{CrCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$  tetraamminodichlorokrom(1+)

Podobna zasada ma zastosowanie przy cytowaniu nazw grup podstawnikowych w nomenklaturze podstawnikowej (patrz Sekcja IR-6.3.1).

(f) Do cytowania nazw atomów szkieletowych w łańcuchach i pierścieniach w nomenklaturze addytywnej (por. Sekcja IR-7.4.3).

Przykłady:

13.  $\text{HOS(O)}_2\text{SeSH}$
14. 1,4-dihydrido-2,2-dioksido-1-oksy-3-seleny-2,4-disulfo-[4]katena

(g) Przy konstruowaniu nazwy związku addycyjnego (formalnego), nazwy poszczególnych składników są uporządkowane najpierw według liczby każdego składnika, a następnie alfabetycznie. (Patrz Sekcja IR-5.5.)

### **IR-2.15.3 Inne reguły porządkowania**

#### **IR-2.15.3.1 Porządkowanie pierwiastków na podstawie układu okresowego**

Jedna z ważnych sekwencji pierwiastków opartych na układzie okresowym jest pokazana w Tabeli VI. Kolumny pierwiastków (1 do 18) są połączone strzałkami prowadzącymi w kierunku

od pierwiastków mniej metalicznych do bardziej metalicznych. Tylko wodór (H) ma wyjątkową pozycję. Ten porządek ma swoje źródło w rozważaniach elektroujemności, chociaż tlen jest obecnie umieszczony w swojej zwykłej pozycji w grupie 16. Jest on używany do porządkowania symboli pierwiastków i nazw pierwiastków w następujących przypadkach:

(a) W nazwach składu związków dwuskładnikowych i odpowiadających im wzorach, pierwiastek napotkany jako ostatni podczas podążania za strzałką w Tabeli VI jest reprezentowany jako pierwszy we wzorze, jak również w nazwie.

Przykłady:

- |              |                    |
|--------------|--------------------|
| 1. $S_2Cl_2$ | dichlorek disiarki |
| 2. $O_2Cl$   | chlerek dioksygeny |
| 3. $H_2Te$   | tellurek diwodoru  |
| 4. $AlH_3$   | triwodorek glinu   |

(b) W nazwach addytywnych związków wielordzeniowych, atom centralny napotkany jako ostatni podczas podążania za strzałką wymienia się jako pierwszy (patrz rozdziały IR-7.3.2 i IR-9.2.5.1).

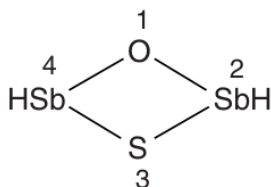
(c) W nazwach addytywnych łańcuchów i pierścieni, przy ustalaniu numeracji atomów szkieletowych (jeśli nie jest ona w pełni określona przez strukturę szkieletu), element napotkany jako pierwszy podczas podążania za strzałkami w Tabeli VI otrzymuje najniższy numer. Należy zauważyć, że terminy z końcówką "y" (Tabela X) są cytowane w porządku alfabetycznym.

Przykład:

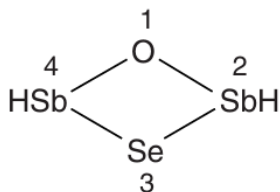
5.  $HOS(O)_2SeSH$   
1,4-dihydrido-2,2-dioksido-1-oksyo-3-seleny-2,4-disulfo-[4]katena

(d) W nazwach Hantzsch-Widmana, element napotkany jako pierwszy podczas podążania za strzałkami w Tabeli VI otrzymuje najniższy numer. Terminy "a" (Tabela X) są cytowane w tej samej kolejności.

Przykłady:



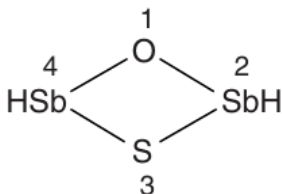
6. 1,3,2,4-oksatiadistybetan



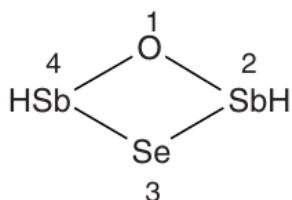
7. 1,3,2,4-oksaselenadistybetan

(e) W nazwach, gdzie heteroatomy zastępujące atomy szkieletowe są oznaczone przedrostkami "a", element napotkany jako pierwszy podczas podążania za strzałkami w Tabeli VI otrzymuje najniższy numer. Terminy "a" (Tabela X) są cytowane w tej samej kolejności.

Przykłady:



8. 1-oksa-3-tia-2,4-distibacyklobutan



9. 1-oksa-3-selena-2,4-distibacyklobutan

IR-2.15.3.2 *Kolejność wodorków macierzystych*

W przypadku gdy istnieje wybór między wodorkami macierzystymi wymienionymi w Tabeli IR-6.1 (lub odpowiadającymi im wodorkami o niestandardowych liczbach wiązań, por. Rozdział IR-6.2.2.2), nazwa opiera się na wodorku macierzystym pierwiastka występującego jako pierwszy w sekwencji:

N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl > O > S > Se > Te > C > F > Cl > Br > I

Ma to szczególne zastosowanie przy nazywaniu związków metaloorganicznych pierwiastków grup 13-16, gdy trzeba dokonać wyboru między kilkoma wodorkami macierzystymi (Rozdział IR-10.3.4).

Przykład:

1.  $\text{AsCl}_2\text{GeH}_3$  dichloro(germylo)arsan

Należy zauważyć, że ze względu na reguły nomenklatury podstawnikowej, powyższa kolejność nie musi być koniecznie stosowana, nawet jeśli w związku występują dwa lub więcej pierwiastków z tej sekwencji. Na przykład, nazwa podstawnikowa dla  $\text{HTeOH}$  to tellanol, tzn. oparta na tellanie, a nie oksydanie, ponieważ charakterystyczna grupa OH musi być cytowana jako przyrostek.

*IR-2.15.3.3 Kolejność grup charakterystycznych w nomenklaturze podstawnikowej*

W nomenklaturze podstawnikowej określona jest kolejność wyboru głównej grupy funkcyjnej (patrz Rozdział P-41 w Ref.1).

*IR-2.15.3.4 Kolejność ligandów we wzorach i nazwach*

We wzorach związków koordynacyjnych, wzory lub skróty reprezentujące ligandy są wymieniane w porządku alfabetycznym jako zasada ogólna. Ligandy mostkujące wymienia się bezpośrednio po ligandach terminalnych tego samego rodzaju (jeśli występują) i w rosnącej kolejności krotności mostkowania. (Patrz również Rozdziały IR-9.2.3 i IR-9.2.5.)

W nazwach związków koordynacyjnych nazwy ligandów poprzedzają nazwę atomu centralnego i są wymieniane w porządku alfabetycznym. Dla każdego typu ligandu, ligandy mostkujące wymienia się bezpośrednio przed ligandami terminalnymi tego samego rodzaju (jeśli występują), np. di- $\mu$ -chlorido-tetrachlorido, oraz w malejącej kolejności krotności mostkowania, np.  $\mu_3$ -oksido-di- $\mu$ -oksido.... (Patrz również Rozdziały IR-9.2.2 i IR-9.2.5.1.)

*IR-2.15.3.5 Kolejność składników we wzorach i nazwach soli*

We wzorach i nazwach soli, soli podwójnych i związków koordynacyjnych, kationy poprzedzają aniony. Kolejność w obrębie każdej z tych grup jest alfabetyczna (por. Rozdział IR-2.15.2).

*IR-2.15.3.6 Modyfikacja izotopowa*

W związkach modyfikowanych izotopowo obowiązuje zasada regulująca kolejność cytowania symboli nuklidów. (Patrz Rozdział II-2.2.5 w Ref. 2.)

*IR-2.15.3.7 Priorytety stereochemiczne*

W nomenklaturze stereochemicznej związków koordynacyjnych, procedura przypisywania liczb pierwszeństwa atomom ligandowym w jednojądrowym układzie koordynacyjnym opiera się na standardowych regułach sekwencyjnych opracowanych dla chiralnych związków węgla (reguły Cahn, Ingolda, Preloga lub CIP, patrz Rozdział IR-9.3.3.2).

*IR-2.15.3.8 Hierarchiczna kolejność znaków interpunkcyjnych*

W nazwach związków koordynacyjnych i związków boru, znaki interpunkcyjne używane do oddzielania symboli atomów od lokantów numerycznych, lokantów wskazujących atomy



mostkujące oraz różnych innych zestawów lokantów, które mogą występować, są uporządkowane według następującej hierarchii:

Oto tłumaczenie tych sekcji na język polski:

średnik > dwukropek > przecinek.

Dwukropek jest używany tylko dla ligandów mostkujących, więc bardziej ograniczona ogólna hierarchia to po prostu przecinek < średnik. Sekwencja przy określaniu ligandów mostkujących to przecinek < dwukropek. (Patrz Przykład 2 w Rozdziale IR-2.5.2 oraz Rozdział IR-9.2.5.5.)

## **IR-2.16 UWAGI KOŃCOWE**

W tym rozdziale zebrano pod wspólnymi nagłówkami różne zastosowania liter, liczb i symboli w nazwach i wzorach, aby zapewnić łatwą kontrolę zgodności konstruowanej nazwy lub wzoru z przyjętą praktyką. Jednak ten rozdział nie jest wystarczający, aby wyjaśnić wszystkie reguły potrzebne do zbudowania nazwy lub wzoru, dlatego zaleca się czytelnikowi zapoznanie się z innymi odpowiednimi rozdziałami w celu uzyskania bardziej szczegółowego omówienia.

## **IR-2.17 BIBLIOGRAFIA**

1. "Nomenklatura Chemii Organicznej, Zalecenia IUPAC", red. W.H. Powell i H. Favre, Królewskie Towarzystwo Chemiczne, w przygotowaniu: [Zobacz także: "Nomenklatura Chemii Organicznej", Pergamon Press, Oxford, 1979; "Przewodnik po Nomenklaturze IUPAC Związków Organicznych, Zalecenia 1993", red. R. Panico, W.H. Powell i J.-C. Richer, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993; oraz poprawki w Pure Appl. Chem., 71, 1327-1330 (1999)].
2. "Nomenklatura Chemii Nieorganicznej II, Zalecenia IUPAC 2000", red. J.A. McCleverty i N.G. Connelly, Królewskie Towarzystwo Chemiczne, 2001. (Czerwona Księga II.)
3. "Kompedium Nomenklatury Makromolekularnej", red. W.V. Metanomski, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. (Fioletowa Księga. Drugie wydanie planowane na 2005 rok).
4. "Nomenklatura Chemii Nieorganicznej", Zalecenia IUPAC 1990, red. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
5. J.B. Casey, W.J. Evans i W.H. Powell, Inorg. Chem., 20, 1333-1341 (1981).
6. R.S. Cahn, C. Ingold i V. Prelog, Angew. Chem., Int. Ed. Engl., 5, 385-415 (1966); V. Prelog i G. Helmchen, Angew. Chem., Int. Ed. Engl., 21, 567-583 (1982).

## **IR-3 Pierwiastki**

### **Spis treści**

#### **IR-3.1 Nazwy i symbole atomów**

##### **IR-3.1.1 Systematyczna nomenklatura i symbole nowych pierwiastków**

#### **IR-3.2 Określanie masy, ładunku i liczby atomowej za pomocą wskaźników (dolnych i górnych)**

#### **IR-3.3 Izotopy**

##### **IR-3.3.1 Izotopy pierwiastka**

##### **IR-3.3.2 Izotopy wodoru**

#### **IR-3.4 Pierwiastki (lub substancje pierwiastkowe)**

##### **IR-3.4.1 Nazwa pierwiastka o nieskończonym wzorze cząsteczkowym lub strukturze**

##### **IR-3.4.2 Odmiany alotropowe pierwiastków**

##### **IR-3.4.3 Nazwy odmian alotropowych o określonym wzorze cząsteczkowym**

##### **IR-3.4.4 Krystaliczne odmiany alotropowe pierwiastka**

##### **IR-3.4.5 Odmiany bezpostaciowe ciał stałych i ogólnie znane odmiany alotropowe o nieokreślonej strukturze**

#### **IR-3.5 Pierwiastki w układzie okresowym**

#### **IR-3.6 Odnośniki literaturowe**

### **IR-3.1 Nazwy i symbole atomów**

Pochodzenie nazw niektórych pierwiastków, takich jak antymon, zaginęło w odległej przeszłości. Inne pierwiastki, odkryte w ciągu ostatnich trzech stuleci, otrzymały nazwy związane z różnymi skojarzeniami dotyczącymi ich pochodzenia, właściwości fizycznych lub chemicznych.

W przeszłości zdarzało się, że niektórym pierwiastkom nadawano dwie nazwy, ponieważ dwie grupy badawcze przypisywały sobie ich odkrycie. Aby uniknąć takich nieporozumień, w 1947 roku ustalono, że po udowodnieniu istnienia danego pierwiastka ponad wszelką wątpliwość, odkrywcy będą mieli prawo zasugerować jego nazwę Komisji Nomenklatury Chemii Nieorganicznej (CNIC) działającej przy Międzynarodowej Unii Chemii Czystej i Stosowanej (IUPAC). Jedynie CNIC może rekomendować tę nazwę Radzie IUPAC w celu podjęcia ostatecznej decyzji.

Zgodnie z aktualną procedurą<sup>1</sup>, doniesienia o odkryciu nowego pierwiastka są najpierw analizowane przez wspólny komitet IUPAC i Międzynarodowej Unii Fizyki Czystej i Stosowanej (IUPAP), który ustala pierwszeństwo odkrycia. Następnie uznani odkrywcy są zapraszani do zaproponowania nazwy pierwiastka Działowi Chemii Nieorganicznej IUPAC, który formalnie rekomenduje tę nazwę Radzie IUPAC. Należy podkreślić, że nazwa każdego nowego pierwiastka, wynikająca z powyższego procesu i zatwierdzona przez Radę, nie powinna zawierać informacji o pierwszeństwie odkrycia. Zasada ta dotyczy również nazw zatwierdzonych przez Radę w przeszłości, sięgającej nawet czasów sprzed udokumentowanej historii.

Nazwy atomów o liczbach atomowych od 1 do 111, zatwierdzone przez IUPAC w języku angielskim, są przedstawione w porządku alfabetycznym w Tabeli I\*. Zaleca się, aby nazwy w różnych językach były do siebie zbliżone, jednak respektuje się nazwy od dawna stosowane i dobrze zakorzenione, nawet jeśli różnią się w poszczególnych językach. W przypisie do Tabeli I przytoczono niektóre nazwy, których obecnie nie używa się w języku angielskim, ale stanowią one podstawę symbolu atomowego lub przedrostków stosowanych w nomenklaturze.

We wzorze chemicznym każdy atom jest reprezentowany przez jednoznaczny symbol, jak pokazano w Tabeli I. Ponadto symbole D i T mogą być używane dla izotopów wodoru o liczbach masowych odpowiednio 2 i 3 (patrz IR-3.3.2).

### IR-3.1.1 Systematyczne nazewnictwo i symbole nowych pierwiastków

Nowo odkryte pierwiastki mogą być cytowane w literaturze naukowej, lecz dopóki nie otrzymają stałej nazwy i symbolu od IUPAC, należy stosować tymczasową nazwę. Takie pierwiastki mogą być oznaczane za pomocą ich liczb atomowych, na przykład „pierwiastek 120”. Ponadto, IUPAC zatwierdził systematyczne nazewnictwo i serię trój-literowych symboli (por. Tabela II)<sup>2</sup>.

Nazwę wywodzi się wprost z liczby atomowej pierwiastka używając następujących rdzeni liczbowych:

0 = nil	3 = tri	6 = hex	9 = enn
1 = un	4 = quad	7 = sept	
2 = bi	5 = pent	8 = oct	

Rdzenie łączy się w tej samej kolejności, w jakiej cyfry występują w liczbie atomowej. W języku angielskim nazwę kończy się przyrostkiem „-ium”. Komisja Nomenklatury Nieorganicznej PTChem uznała wprowadzenie tej końcówki w języku polskim za zbędne. Końcowe „n” w rdzeniu „enn” należy pominąć, jeżeli znajduje się przed rdzeniem „nil”. W języku angielskim należy opuścić końcowe „i” w rdzeniach „bi” i „tri”, jeśli występuje ono przed przyrostkiem „-ium”.

Symbol pierwiastka jest zbudowany z początkowych liter rdzeni liczbowych występujących w nazwie.

Przykład:

1. Pierwiastek 113 = ununtri, symbol Uut.

### IR-3.2 Określanie masy, ładunku i liczby atomowej za pomocą wskaźników (dolnych i górnych)

Masę, ładunek i liczbę atomową nuklidu określa się za pomocą trzech wskaźników (dolnych i górnych) rozmieszczonych wokół symbolu. Zajmują one następujące położenia:

lewy górny wskaźnik:	liczba masowa
lewy dolny wskaźnik:	liczba atomowa
prawy górny wskaźnik:	ładunek jonu

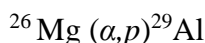
Ładunek umieszczony na atomie o symbolu A zapisuje się jako  $A^{n+}$  lub  $A^{n-}$  a nie jako  $A^{+n}$  lub  $A^{-n}$ .

Prawa dolna pozycja symbolu atomowego jest zarezerwowana dla indeksu wskazującego liczbę tych atomów we wzorze. Na przykład, S<sub>8</sub> jest wzorem cząsteczki zawierającej osiem atomów siarki (por. IR-3.4). Formalizm przedstawiania stopni utlenienia lub ładunków przedstawiono w IR-4.6.1.

Przykład:

1.  ${}_{16}^{32}\text{S}^{2+}$  przedstawia podwójnie zjonizowany atom siarki o liczbie atomowej 16 i liczbie masowej 32.

Reakcję jądrową pomiędzy  ${}^{26}_{12}\text{Mg}$  i jądrem helu  ${}^4_2\text{He}$  prowadzącą do otrzymania  ${}^{29}_{13}\text{Al}$  i jądra  ${}^1_1\text{H}$  zapisuje się następująco:



Sposób używania symboli atomowych w celu wykazania ich modyfikacji izotopowej we wzorach chemicznych oraz w nazewnictwie izotopowo modyfikowanych związków chemicznych przedstawiono odpowiednio w IR-4.5 oraz w Rozdziale II-2 odnośnika [4].

### IR-3.3 Izotopy

#### IR-3.3.1 Izotopy pierwiastka

Wszystkie izotopy danego pierwiastka mają tę samą nazwę (zob. także IR-3.3.2) a rozróżnia się je poprzez liczbę masową (por IR 3.2). Na przykład atom o liczbie atomowej 8 i liczbie masowej 18 nosi nazwę tlen-18 i ma symbol  ${}^{18}\text{O}$ .

#### IR-3.3.2 Izotopy wodoru

Wodór stanowi wyjątek od reguły przedstawionej w rozdziale IR-3.3.1, ponieważ jego trzy izotopy  ${}^1\text{H}$ ,  ${}^2\text{H}$  i  ${}^3\text{H}$  mogą mieć alternatywne nazwy: prot, deuter i tryt. Dwa ostatnie izotopy można przedstawić symbolami D i T. Zaleca się jednak stosowanie zapisu  ${}^2\text{H}$  i  ${}^3\text{H}$ , ponieważ symbole D i T zaburzają porządek alfabetyczny we wzorach chemicznych (zob. IR-4.5). Układ zbudowany z mionu (cząstki elementarnej) i elektronu zachowuje się jak lekki izotop wodoru, ma nazwę mionium i symbol Mu.<sup>5</sup> Dla kationów  ${}^1\text{H}^+$ ,  ${}^2\text{H}^+$ ,  ${}^3\text{H}^+$  i  $\text{Mu}^+$  stosuje się odpowiednio nazwy: proton, deutron, tryton i mion. Ponieważ nazwy „proton” używa się często w sposób niejednoznaczny, zarówno dla izotopowo czystych jonów  ${}^1\text{H}^+$ , jak też dla mieszaniny nie rozdzielonej na izotopy, występującej naturalnie, zaleca się określenie takiej mieszaniny nazwą „hydron” wywodzącą się od nazwy wodoru (*hydrogen*).

### IR-3.4 Pierwiastki (lub substancje pierwiastkowe)

#### IR-3.4.1 Nazwa pierwiastka o nieokreślonym wzorze cząsteczkowym lub strukturze

Substancja składająca się z atomów danego pierwiastka o nieokreślonym wzorze lub mieszanina odmian alotropowych (patrz IR-3.4.2 do IR-3.4.5) nosi taka samą nazwę jak atom.

### IR-3.4.2 Odmiany alotropowe pierwiastków

Odmiany alotropowe pierwiastka noszą nazwę atomu, z którego się wywodzą, połączoną z deskryptorem wskazującym odmianę. Powszechnie stosowanymi deskryptorami są litery greckie ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  itd.), barwy lub niekiedy nazwy minerałów (np. grafit i diament dla dobrze znanych odmian węgla). Nazwy takie należy uważać za przejściowe, stosowane tylko do czasu poznania struktury, a wówczas zaleca się używania racjonalnego systemu, opartego na wzorze cząsteczkowym (patrz IR-3.4.3) lub strukturze krystalicznej (patrz. IR-3.4.4). Nazw zwyczajowych używa się również w przypadku amorficznych odmian pierwiastka a także dla substancji, które na ogół występują w postaci mieszanin o bardzo zbliżonej strukturze (jak np. grafit) lub wykazują słabo określoną, nieuporządkowaną strukturę (jak np. czerwony fosfor) (patrz IR-3.4.5)

### IR-3.4.3 Nazwy odmian alotropowych o określonym wzorze cząsteczkowym

Nazwy systematyczne wywodzą się od liczby atomów w cząsteczce, wskazanej przez zwielokrotniający przedrostek z Tabeli IV. Przedrostek „mono” jest używany tylko wówczas, gdy pierwiastek normalnie nie występuje w jedno-atomowym stanie. Przedrostek „poli” można stosować wtedy, gdy liczba atomów jest duża i nieznaną, jak np. w długich łańcuchach lub dużych pierścieniach. Jeżeli zachodzi konieczność określenia struktury, można stosować odpowiednie przedrostki z Tabeli V. Jeżeli pragnie się zaznaczyć odpowiednią formę polimorficzną pierwiastka o określonej strukturze (takiej jak odmiany  $\alpha$ ,  $\beta$  lub  $\gamma$  siarki S<sub>8</sub>), należy zastosować metodę podaną w IR-3.4.4. (patrz Przykłady 13-15 w IR-3.4.4).

Przykłady:

	<i>Wzór</i>	<i>Nazwa systematyczna</i>	<i>Akceptowana nazwa alternatywna</i>
1	Ar	argon	
2	H	monowodór	
3	N	monoazot	
4	N <sub>2</sub>	diazot	
5	N <sub>3</sub> <sup>•</sup>	triazot(•)	
6	O <sub>2</sub>	ditlen	tlen
7	O <sub>3</sub>	tritlen	ozon
8	P <sub>4</sub>	tetrafosfor	biały fosfor
9	S <sub>6</sub>	heksasiarka	siarka $\epsilon$
10	S <sub>8</sub>	<i>cyklo</i> -oktasiarka	siarka $\alpha$ , siarka $\beta$ , siarka $\gamma$
11	Sn	polisiarka	siarka $\mu$ (siarka plastyczna)
12	C <sub>60</sub>	heksakontawęgiel	[60]fuleren

W przykładzie 12 nazwa: [60]fuleren uważana jest za dozwoloną, niesystematyczną nazwę specyficznej struktury C<sub>60</sub>. Więcej w Sekcji P-27 odnośnika [6].

### IR-3.4.4 Krystaliczne odmiany alotropowe pierwiastka.

Krystaliczne odmiany alotropowe pierwiastka są odmianami polimorficznymi pierwiastków. Każdą z tych odmian można nazwać, dodając w nawiasie, po nazwie atomu symbol Pearsona (patrz IR-11.5.2)<sup>7</sup>. Ten symbol definiuje strukturę odmiany alotropowej według jej sieci Bravais'go (układ krystalograficzny, typ komórki elementarnej, patrz

Tabela IR-3.1) oraz liczbę atomów w komórce elementarnej. I tak, „żelazo(cF4) jest odmianą alotropową żelaza (żelazo  $\gamma$ ) o sieci regularnej (c), ściennie centrowanej (F), zawierającej 4 atomy żelaza w komórce elementarnej.

**Tabela IR-3.1** *Symbole Pearsona zastosowane dla czternastu sieci Bravais'a*

<i>Układ</i>	<i>Symbol sieciowy<sup>a</sup></i>	<i>Symbol Pearsona</i>
Trójskośny	<i>P</i>	<i>aP</i>
Jednoskośny	<i>P</i>	<i>mP</i>
	<i>S<sup>b</sup></i>	<i>mS</i>
Ortorombowy	<i>P</i>	<i>oP</i>
	<i>S</i>	<i>oS</i>
	<i>F</i>	<i>oF</i>
	<i>I</i>	<i>oI</i>
Tetragonalny	<i>P</i>	<i>tP</i>
	<i>I</i>	<i>tI</i>
Heksagonalny (i trygonalny P)	<i>P</i>	<i>hP</i>
Romboedryczny	<i>R</i>	<i>hR</i>
Regularny	<i>P</i>	<i>cP</i>
	<i>F</i>	<i>cF</i>
	<i>I</i>	<i>cI</i>

<sup>a</sup> *P*, *S*, *F*, *I* i *R* oznaczają odpowiednio, sieć: prymitywną, centrowaną na podstawach, ściennie (płasko) centrowaną, przestrzennie centrowaną, i romboedryczną. Litera *S* jest obecnie stosowana w miejsce dawnej litery *C*.

<sup>b</sup> alternatywny wybór komórki elementarnej z wyróżnioną osią *y*.

Przykłady:

	<i>Symbol</i>	<i>Nazwa systematyczna</i>	<i>Akceptowana nazwa alternatywa</i>
1	$P_n$	fosfor(oS8)	czarny fosfor
2	$C_n$	węgiel(cF8)	diament
3	$C_n$	węgiel(hP4)	grafit (forma potoczna)
4	$C_n$	węgiel(hR6)	grafit (forma mniej potoczna)
5	$Fe_n$	żelazo(cI2)	żelazo $\alpha$
6	$Fe_n$	żelazo(cF4)	żelazo $\gamma$
7	$Sn_n$	cyna(cF8)	cyna $\alpha$ lub szara
8	$Sn_n$	cyna(tI4)	cyna $\beta$ lub biała
9	$Mn_n$	mangan(cI58)	mangan $\alpha$
10	$Mn_n$	mangan(cP20)	mangan $\beta$
11	$Mn_n$	mangan (cF4)	mangan $\gamma$
12	$Mn_n$	mangan(cI2)	mangan $\delta$
13	S8	siarka(oF128)	siarka $\alpha$
14	S8	siarka(mP48)	siarka $\beta$
15	S8	siarka(mP32)	siarka $\gamma$

Niekiedy symbole Pearsona nie odróżniają odmian krystalograficznych pierwiastka. W takich przypadkach dodaje się w nawiasach odpowiednią grupę przestrzenną. Jeśli i to nie pomaga, należy wymienić charakterystyczne różnice parametrów sieciowych. Można też zastosować alternatywny zapis wzoru związku (patrz IR-4.2.5 i Rozdział IR-11).

#### IR-3.4.5 Odmiany bezpostaciowe ciał stałych i ogólnie znane odmiany alotropowe o nieokreślonej strukturze.

Rozróżnia się je stosując zwyczajowe deskryptory, takie jak litery greckie, nazwy określające właściwości fizyczne lub nazwy minerałów.

Przykłady:

1. C<sub>n</sub> węgiel szklisty
2. C<sub>n</sub> węgiel grafitowy (węgiel w formie grafitu bez względu na defekty strukturalne)
3. P<sub>n</sub> fosfor czerwony [struktura zaburzona, zawierająca częściowo fosfor (oS8) i częściowo tetrafosfor]
4. As<sub>n</sub> arsen bezpostaciowy.

#### IR-3.5 Pierwiastki w układzie okresowym

Grupy pierwiastków w układzie okresowym (patrz wewnętrzna strona okładki) są ponumerowane od 1 do 18. Pierwiastki (za wyjątkiem wodoru) grup 1,2 oraz 13-18 należą do grup głównych i za wyjątkiem grupy 18, pierwsze dwa pierwiastki każdej grupy głównej są określane jako pierwiastki typowe. Można również stosować litery s, p, d i f do odróżnienia poszczególnych bloków pierwiastków. Na przykład pierwiastki grup 3 – 12 są pierwiastkami bloku d. Są one potocznie nazywane pierwiastkami przejściowymi, chociaż pierwiastki grupy 12. nie zawsze są do tej grupy zaliczane. Pierwiastki bloku f określane są czasami jako pierwiastki wewnętrznoprzejściowe. W razie potrzeby, można nazywać różne grupy używając nazwy pierwszego pierwiastka w danej grupie, na przykład pierwiastki grupy boru (Ba, Al, Ga, In, Tl) nazywa się borowcami, pierwiastki grupy tytanu (Ti, Zr, Hf, Rf) – tytanowcami itd.

Komisja IUPAC przyjęła następujące zbiorcze nazwy dla grup pierwiastków:

metale alkaliczne (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr), metale ziem alkalicznych (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra), pniktogeny (azotowce)<sup>8</sup> (N, P, As, Sb, Bi), chalkogeny (tlenowce) (O, S, Se, Te, Po), halogeny (fluorowce) (F, Cl, Br, I, At), gazy szlachetne (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn), lantanowce (La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu), metale ziem rzadkich Sc, Y i lantanowce) i aktynowce (Ac, Th, Pa, U Np., Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr).

Ogólne określenia pniktydek, chalkogenidek i chalkogenidek (lub halidek) są powszechnie używane w nazewnictwie związków pniktogenów, chalkogenów i halogenów.

W języku angielskim lantanowce określa się alternatywnie „lantanoids” lub „lanthanides”. Pierwsza z tych nazw oznacza „podobny do lantanu” i nie powinna obejmować samego lantanu, jednak powszechnie lantan włącza się do lantanowców. To samo dotyczy aktynowców. Pomimo to nazwy „lantanoids” i „actinoids” są bardziej preferowane, niż „lanthanides” i „actinides” gdyż w jęz. ang. końcówka “ide” wskazuje zazwyczaj jon ujemny.

#### IR-3.6 Literatura

1. Naming of New Elements, W.H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, **74**, 787-791 (2002).

2. Recommendations for the Naming of Elements of Atomic Numbers Greater than 100, J.Chatt, *Pure Appl. Chem.*, **51**, 381-384 (1979).
3. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Second Edn., eds. I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kally and K. Kuchitsu, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993. (Zielona książka. Trzecia edycja w przygotowaniu.)
4. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001. (Red Book II.)
5. Names for Muonium and Hydrogen Atoms and Their Ions, W.H. Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, **73**, 377-379 (2001).
6. *Nomenclature of Organic Chemistry IUPAC Recommendations*, W.H. Powell and H. Havre, Royal Society of Chemistry, w przygotowaniu.
7. W.B. Pearson, *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*. Vol. 2, Pergamon Press. Oxford, 1967, pp1,2. Stabelaryzowane parametry sieciowe i dane dla pierwiastków metalicznych i półmetalicznych, patrz pp.79-91. Patrz także, P. Villars i L.D. Calvert, *Pearson Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, Vols. 1-3, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, USA, 1985.
8. W języku angielskim używa się też alternatywnej nazwy „pnicogen”.



## **IR-4 Wzory**

### **Spis treści**

**IR-4.1 Wprowadzenie**

**IR-4.2 Definicje rodzajów wzoru**

**IR-4.2.1 Wzory empiryczne**

**IR-4.2.2 Wzory cząsteczkowe**

**IR-4.2.3 Wzory strukturalne i stosowanie nawiasów we wzorach**

**IR-4.2.4 Wzory związków (formalnie) addycyjnych**

**IR-4.2.5 Informacje o strukturze ciała stałego**

**IR-4.3 Określanie ładunku jonu.**

**IR-4.4 Kolejność występowania symboli we wzorze**

**IR-4.4.1 Wprowadzenie**

**IR-4.4.2 Zasady kolejności**

**IR-4.4.2.1 Elektryczność**

**IR-4.4.2.2 Kolejność alfabetyczna**

**IR-4.4.3 Wzory specyficznych klas związków**

**IR-4.4.3.1 Związki binarne**

**IR-4.4.3.2 Formalizm postępowania jak dla związków koordynacyjnych**

**IR-4.4.3.3 Związki łańcuchowe**

**IR-4.4.3.4 Uogólnione wzory soli**

**IR-4.4.3.5 Związki (formalnie) addycyjne**

**IR-4.4.4 Skróty stosowane dla ligandów**

**IR-4.5 Związki modyfikowane izotopowo**

**IR-4.5.1 Ogólne zasady**

**IR-4.5.2 Związki podstawione izotopowo**

**IR-4.5.3 Związki znaczone izotopowo**

**IR-4.5.3.1 Rodzaje znakowania**

**IR-4.5.3.2 Związki znaczone specyficznie**

**IR-4.5.3.3 Związki znaczone selektywnie**

**IR-4.6 Możliwe modyfikatory wzorów**

**IR-4.6.1 Stopień utlenienia**

**IR-4.6.2 Wzory rodników**

**IR-4.6.3 Wzory związków aktywnych optycznie**

**IR-4.6.4 Wskazanie stanów wzbudzonych**

**IR-4.6.5 Modyfikatory strukturalne**

**IR-4.7 Odnośniki literaturowe**

## IR-4.1 Wprowadzenie

Wzory (empiryczne, cząsteczkowe i strukturalne, jak opisano poniżej) pozwalają na proste i przejrzyste odnoszenie się do danych związków. Są one szczególnie ważne w równaniach chemicznych oraz przy opisie procesów chemicznych. W celu uniknięcia dwuznaczności oraz np. dla celów dokumentacyjnych, zaleca się standaryzację.

## IR-4.2 Definicje rodzajów wzoru

### IR-4.2.1 Wzory empiryczne

Wzory empiryczne związku tworzy się przez zestawienie symboli atomowych z odpowiednimi wskaźnikami (liczby całkowite) pisanymi u dołu symbolu, tak aby otrzymać najprostszy wzór wyrażający skład. Kolejność wymieniania symboli przedstawiono w IR-4.4. *Przy braku innych kryteriów uporządkowania* (na przykład przy braku wystarczających danych strukturalnych), we wzorze empirycznym należy stosować kolejność alfabetyczną symboli, z wyjątkiem związków zawierających węgiel, w których C umieszcza się jako pierwszy a H jako drugi symbol<sup>1</sup>.

Przykłady:

1.  $\text{BrClH}_3\text{N}_2\text{NaO}_2\text{Pt}$
2.  $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{ClFe}$

### IR-4.2.2 Wzory cząsteczkowe

Dla związków złożonych z odrębnych cząsteczek *wzór cząsteczkowy*, w przeciwieństwie do wzoru empirycznego, może służyć do przedstawienia rzeczywistego składu cząsteczki. Kolejność wymieniania symboli podano w IR-4.4.

Wybór wzoru zależy od chemicznego składu. W niektórych przypadkach wzór empiryczny może odpowiadać składowi cząsteczki a jedyną różnicą pomiędzy tymi dwoma rodzajami wzorów jest kolejność symboli atomów. Jeśli określenie składu nie jest konieczne lub możliwe, np. w przypadku polimerów, używa się dolnego wskaźnika, takiego jak *n*.

Przykłady:

	<i>Wzór cząsteczkowy</i>	<i>Wzór empiryczny</i>
1.	$\text{S}_8$	S
2.	$\text{S}_n$	S
3.	$\text{SF}_6$	$\text{F}_6\text{S}$
4.	$\text{S}_2\text{Cl}_2$	ClS
5.	$\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_6$	$\text{H}_2\text{O}_3\text{P}$
6.	$\text{Hg}_2\text{Cl}_2$	ClHg
7.	$\text{N}_2\text{O}_4$	$\text{NO}_2$

### IR-4.2.3 Wzory strukturalne i stosowanie nawiasów we wzorach

Wzór strukturalny dostarcza częściowej lub kompletnej informacji o sposobie wiązania atomów w cząsteczce oraz ich ułożeniu w przestrzeni. W prostych przypadkach, wzór

liniowy, który jest sekwencją symboli atomowych, dostarcza informacji strukturalnych pod warunkiem, że czytelnik wie, iż wzór przedstawia porządek atomów w strukturze liniowej.

Przykłady:

1. HOCN (wzór empiryczny CHNO)
2. HNCO (wzór empiryczny także CHNO)
3. HOOH (wzór empiryczny HO).

Jeśli związek ma choćby nieznacznie bardziej złożoną strukturę, użycie nawiasów we wzorze liniowym staje się konieczne w celu oddzielenia podgrup atomów. Aby uniknąć dwuznaczności, należy używać różnego rodzaju nawiasów dla powtarzających się jednostek i odgałęzień.

Reguły stosowania nawiasów we wzorach cząsteczkowych są następujące:

- (i) Powtarzające się grupy atomów w związkach łańcuchowych umieszczane są w nawiasach kwadratowych.
- (ii) Rozgałęzienia głównego łańcucha i grupy (ligandy) związane z atomem centralnym są umieszczane w nawiasach okrągłych (z wyjątkiem pojedynczych atomów, jeśli nie ma żadnych wątpliwości, co do ich wiązań w strukturze, np. wodór w wodorkach o strukturze łańcuchowej).
- (iii) Wzór lub część wzoru, który reprezentuje cząsteczkę, może być umieszczony w nawiasach. Jeśli cały wzór jest objęty nawiasem, musi to być nawias kwadratowy, z wyjątkiem przypadku, kiedy stosuje się zasadę (v)
- (iv) Część wzoru, która jest powtarzana zgodnie z dolnym wskaźnikiem, może być także umieszczona w nawiasach okrągłych lub klamrowych, z wyjątkiem przypadku powtarzających się grup atomów w związkach łańcuchowych (patrz reguła (i)).
- (v) W przypadku polimerów, jeśli mają być zaznaczone wiązania pomiędzy powtarzającymi się jednostkami, to powtarzającą się jednostkę umieszcza się w nawiasach okrągłych, z nałożonymi kreskami, które reprezentują wiązania. (Jeśli typograficznie jest to niewygodne, kreski można umieścić -przed i po- nawiasach).
- (vi) W nawiasach kwadratowych, poszczególne nawiasy są umieszczane w następujący sposób:  
( ), { ( ) }, { { ( ) } }, { { { ( ) } } }, itd.
- (vii) Atomy lub grupy atomów, które są przedstawiane razem z przedrostkiem (na przykład modyfikator strukturalny  $\mu$ ), są umieszczane w nawiasach w kolejności jak w punkcie (vi).

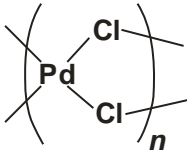
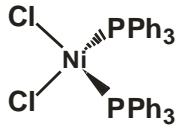
Używanie nawiasów w celu określenia odmian izotopowych opisano w (IR-4.5)

W porównaniu z wzorami liniowymi, przedstawione wzory (przykłady 12 i 13 podane niżej) dają pełniejszą informację o strukturze.

(Reguły potrzebne dla uporządkowania symboli w przykładach podanych niżej, są dane w IR-4.4.3)

Przykłady:

4.  $\text{SiH}_3[\text{SiH}_2]_8\text{SiH}_3$  [reguła (i)]
5.  $\text{SiH}_3 [\text{SiH}_2]_5\text{SiH}(\text{SiH}_3) \text{SiH}_2 \text{SiH}_3$  [reguła (i) i (ii)]

6.	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	[reguła (iv)]
7.	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2(\text{SO}_4)_3$	[reguła (iii), (iv), (vi)]
8.	$[\{\text{Rh}(\mu\text{-Cl})(\text{CO})_2\}_2]$	[reguła (iii), (iv), (vii)]
9.	$\text{K}[\text{Os}(\text{N})_3]$	[reguła (ii) i (iii)]
10.	$-(\text{S})_n-$	[reguła (v)]
11.	$(\text{HBO}_2)_n$ , lub $-(\text{B}(\text{OH})\text{O})_n-$	[reguła (ii) i (v)]
12.		
13.		
14.	$\text{NaCl}$	
15.	$[\text{NaCl}]$	

Pierwszy wzór w Przykładzie 11 można rozważać jako wzór cząsteczkowy (IR-4.2.2) bez nawiązania do struktury rozważanego polimeru.

W Przykładzie 14 i 15 wzór  $[\text{NaCl}]$  może być użyty dla odróżnienia cząsteczki składającej się z jednego atomu sodu i jednego atomu chloru od ciała stałego o składzie  $\text{NaCl}$ .

#### IR-4.2.4 Wzory związków (formalnie) addycyjnych

We wzorach związków addycyjnych i związków, które formalnie mogą być rozważane jako takie, łącznie z klatratami i solami wielokrotnymi, używa się specjalnego formatu. Proporcje składników podane są za pomocą liczb arabskich poprzedzających wzór składników a wzory składników rozdzielone są za pomocą kropki umieszczonej centralnie. Reguły uporządkowania wzorów składników opisano w IR-4.4.3.5.

Przykłady:

1.  $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
2.  $8\text{H}_2\text{S} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$
3.  $\text{BMe}_3 \cdot \text{NH}_3$

#### IR-4.2.5 Informacje o strukturze ciała stałego

Informacje o strukturze można podawać przez wskazanie typu struktury. Odmiany polimorficzne można przedstawiać, na przykład, dodając w nawiasie skrótowe oznaczenia odpowiedniego układu krystalograficznego (patrz IR-11.5.2 i IR-11.7.2, oraz Tabela IR-3.1). Struktury można również przedstawiać przez dodanie w nawiasie typu związku pisanego kursywą, ale ten sposób

postępowania nie zawsze jest jednoznaczny. Istnieje, co najmniej dziesięć odmian  $ZnS(h)$ . Tam gdzie występuje kilka odmian polimorficznych, krystalizujących w tym samym układzie krystalograficznym, można je rozróżniać za pomocą symboli Pearsona (patrz. IR-3.4.4 i IR-11.5.2). Do wskazania odmiany polimorficznej stosuje się litery greckie, lecz praktyka ta bywa myląca, dlatego nie jest zalecana.

Przykłady:

1.  $TiO_2(t)$  (typ *anatazu*)
2.  $TiO_2(t)$  (typ *rutylu*)
3.  $AuCd(c)$ , lub  $AuCd$  (typ *CsCl*)

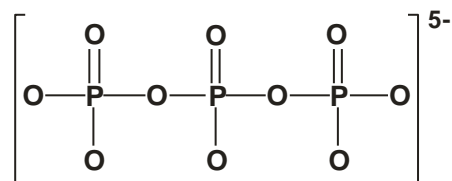
O wzorach roztworów stałych i faz niestechiometrycznych patrz Rozdział IR-11.

### IR-4.3 Określanie ładunku jonu

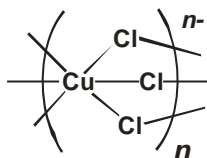
Ładunek jonu określa się za pomocą prawego, górnego wskaźnika, pisząc  $A^{n+}$  lub  $A^{n-}$  (a nie  $A^{+n}$  lub  $A^{-n}$ ). Jeżeli wzór umieszczony jest w nawiasach, prawy, górny wskaźnik jest umieszczony na zewnątrz nawiasów. Dla jonów polimerycznych, ładunek pojedynczej, powtarzającej się jednostki powinien być umieszczony wewnątrz nawiasu, który obejmuje strukturę polimeryczną, albo całkowity ładunek polimeru powinien znajdować się na zewnątrz nawiasu obejmującego ten polimer. (Reguły kolejności wymieniania symboli, w niektórych podanych niżej wzorach, można znaleźć w IR-4.4.3).

Przykłady:

1.  $Cu^+$
2.  $Cu^{2+}$
3.  $NO^+$
4.  $[Al(OH_2)_6]^{3+}$
5.  $H_2NO_3^+$
6.  $[PCl_4]^+$
7.  $As^{3-}$
8.  $HF_2^-$
9.  $CN^-$
10.  $S_2O_7^{2-}$
11.  $[Fe(CN)_6]^{4-}$
12.  $[PW_{12}O_{40}]^{3-}$
13.  $[P_3O_{10}]^{5-}$  lub  $[O_3POP(O)_2OPO_3]^{5-}$  lub



14.  $([CuCl_3]^-)_n$  lub  $.[[CuCl_3]^{n-}]_n$  lub



## IR-4.4 Kolejność występowania symboli we wzorach

### IR-4.4.1 Wstęp

Symbole atomów we wzorze mogą być uszeregowane na różne sposoby. Podrozdział IR-4.4.3 opisuje konwencje zwykle stosowane dla znanych klas związków. Podrozdział IR-4.4.2 podaje znaczenie dwóch pojęć: „elektroujemność” i „kolejność alfabetyczna”.

### IR-4.4.2 Zasady kolejności

#### IR-4.4.2.1 Elektroujemność

Jeżeli elektroujemność jest podstawą kolejności, symbole atomowe są wymieniane zgodnie ze *względną* elektroujemnością, począwszy od pierwiastka o najmniejszej elektroujemności. W tym celu, jako przewodnika, używa się Tabeli IV\*. Zgodnie z konwencją, im dalsza pozycja atomu w Tabeli IV, (zgodnie ze strzałkami), tym atom jest bardziej elektrododatni.

#### IR-4.4.2.2 Kolejność alfabetyczno-liczbowa

Symbole atomów we wzorze liniowym ustawia się w kolejności alfabetycznej. Symbole jednoliterowe mają zawsze pierwszeństwo przed symbolami dwuliterowymi z tą samą literą początkową, np. *B* przed *Be*. Dwuliterowe symbole układa się też w kolejności alfabetycznej, t.j. *Ba* przed *Be*.

Wzory liniowe różnych cząsteczek mogą być podawane w kolejności alfabetyczno-liczbowej, n.p.  $B < BH < BO < B_2O_3$ . Grupę  $NH_4$  traktuje się często jak pojedynczy symbol i dlatego jest umieszczana np. po *Na*.

Poniżej podano, jako przykład, kolejność wymieniania jednostek zawierających azot lub sód:



Taką kolejność dla całego wzoru można stosować w spisach i rejestrach, lecz także do uporządkowania części danego wzoru, zgodnie z zasadą kolejności przedstawionej w Podrozdziale IR-4.4.2.1, jak opisano poniżej dla specyficznych klas związków i jonów.

\*Tabele numerowane cyframi łańcuskimi są umieszczone razem na końcu tej książki.

### IR-4.4.3 Wzory specyficznych klas związków

#### IR-4.4.3.1 Związki binarne

Zgodnie z ustaloną praktyką, dla związków binarnych<sup>2</sup> najczęściej stosuje się kryterium elektroujemności (por IR-4.4.2.1).

Przykłady:

1.  $\text{NH}_3$
2.  $\text{H}_2\text{S}$
3.  $\text{OF}_2$
4.  $\text{O}_2\text{Cl}$
5.  $\text{OCl}^-$
6.  $\text{PH}_4^+$
7.  $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$
8.  $[\text{SiAs}_4]^{8-}$
9.  $\text{RbBr}$
10.  $[\text{Re}_2\text{Cl}_9]^-$
11.  $\text{HO}^-$  lub  $\text{OH}^-$
12.  $\text{Rb}_{15}\text{Hg}_{16}$
13.  $\text{Cu}_5\text{Zn}_8$  i  $\text{Cu}_5\text{Cd}_8$

Należy zauważyć, że zgodnie z powyższą konwencją, wzór jonu wodorotlenowego powinien być zapisywany jako  $\text{HO}^-$ .

Kolejność wg. elektroujemności może być, jako zasada, stosowana do związków zawierających trzy, cztery i więcej pierwiastków. Jednak dla związków zawierających więcej jak dwa pierwiastki, częściej stosowane są inne kryteria porządkowania symboli atomów (por IR-4.4.3.2 do IR-4.4.3.4) we wzorze.

#### IR-4.4.3.2 Formalizm postępowania jak dla związków koordynacyjnych

Nazewnictwo związków koordynacyjnych opisano szczegółowo w Rozdziale IR-9. Tutaj podano krótkie podsumowanie konstrukcji *wzorów* związków koordynacyjnych. Dla celu konstrukcji wzoru wygodnie jest traktować związki wieloatomowe jako związki koordynacyjne.

We wzorze jednostki koordynacyjnej symbol atomu (atomów) centralnego umieszcza się jako pierwszy, po nim wymienia się symbole lub wzory ligandów, o ile dodatkowe informacje o strukturze nie wpłyną na zmianę tej kolejności (por. np. IR-4.4.3.3).

O kolejności wymieniania atomów centralnych decyduje elektroujemność, jak opisano w IR-4.4.2.1. W pisowni, ligandy wymienia się alfabetycznie (IR-4.4.3.3) zgodnie z pierwszym symbolem ich wzorów lub ich skrótów (por. IR-4.4.4). W miarę możliwości, wzór liganda powinien być pisany w taki sposób, aby symbol atomu donora był najbliższym atomu centralnego, z którym jest związany.

Do zamknięcia całej jednostki koordynacyjnej, bez względu na to, czy posiada ładunek, czy też nie, stosuje się nawiasy kwadratowe. Ustaloną praktyką jest używanie zawsze nawiasów kwadratowych dla jednostek koordynacyjnych z atomem centralnym będącym metalem przejściowym.

Przykłady:

1.  $\text{PBrCl}_2$
2.  $\text{SbCl}_2\text{F}$  lub  $[\text{SbCl}_2\text{F}]$
3.  $[\text{Mo}_6\text{O}_{18}]^{2-}$
4.  $[\text{CuSb}_2]^{5-}$
5.  $[\text{UO}_2]^{2+}$
6.  $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$

7.  $[\text{BH}]^{4-}$
8.  $[\text{ClO}_4]^-$  lub  $\text{ClO}_4^-$
9.  $[\text{PtCl}_2\{\text{P}(\text{OEt})_3\}_2]$
10.  $[\text{Al}(\text{OH})(\text{OH}_2)_5]^{2+}$
11.  $[\text{PtBrCl}(\text{NH}_3)(\text{NO}_2)]^-$
12.  $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)(\text{py})]$
13.  $[\text{Co}(\text{en})\text{F}_2(\text{NH}_3)_2]^+$ , lecz  $[\text{CoF}_2(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)(\text{NH}_3)_2]^+$
14.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{N}_3)]^{2-}$

W niektórych przypadkach część wzoru zawierająca różne atomy i pojawiająca się w seriach związków, uważana jest za cząstkę, która odgrywa rolę atomu centralnego i jest wymieniana jako taki, nawet, jeśli to narusza kolejność alfabetyczną ligandów. Na przykład PO i  $\text{UO}_2$  uznane są za pojedyncze cząstki w Przykładach 15 i 16.

Przykłady:

15.  $\text{POBr}_3$  (alfabetycznie,  $\text{PBr}_3\text{O}$ )
16.  $[\text{UO}_2\text{Cl}_2]$  (alfabetycznie,  $[\text{UCl}_2\text{O}_2]$ )

Dla pochodnych wodorków macierzystych (por. Rozdział IR-6) kolejność alfabetyczna ligandów jest tradycyjnie naruszana w ten sposób, że pozostające atomy wodoru wymieniane są jako pierwsze wśród ligandów we wzorze.

Przykłady:

17.  $\text{GeH}_2\text{F}_2$
18.  $\text{SiH}_2\text{BrCl}$
19.  $\text{B}_2\text{H}_5\text{Cl}$

Dla węgloroboranów istniała niepewność, co do kolejności B i  $\text{C}^3$ . Kolejność 'B przed C' zalecana tutaj, jest zgodna zarówno z elektroujemnością jak i kolejnością alfabetyczną (jest to wyjątek w stosunku do kolejności Hilla<sup>1</sup> w IR-4.2.1). Ponadto, atomy węgla, które zastępują szkieletowe atomy boru, wymieniane są zaraz po borze, niezależnie od obecności innych atomów (por. także IR-6.2.4.4).

Przykłady:

20.  $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_5$  (zalecane)
21.  $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_4\text{Br}$  (zalecane)

Istnieje tradycyjny zapis wzorów nieorganicznych kwasów tlenowych, w których jako pierwsze wymieniane są „kwasowe” lub „wymienialne” atomy wodoru (atomy wodoru związane z tlenem), następnie atomy centralne, dalej „niewymienialne” atomy wodoru (atomy wodoru związane bezpośrednio z atomem centralnym) i na końcu tlen. Ten sposób jest alternatywą do zapisywania wzorów nieorganicznych kwasów tlenowych jako wzorów związków koordynacyjnych (por IR-8.3).

Przykłady:

23.  $\text{HNO}_3$  (tradycyjnie) lub  $[\text{NO}_2(\text{OH})]$  (koordynacyjnie)
24.  $\text{H}_2\text{PHO}_3$  (tradycyjnie) lub  $[\text{PHO}(\text{OH})_2]$  (koordynacyjnie)



25.  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  (tradycyjnie) lub  $[\text{PO}_2(\text{OH})_2]^-$  (koordynacyjnie)
26.  $\text{H}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$  (tradycyjnie) lub  $[(\text{HO})_2\text{P}(\text{O})\text{OP}(\text{O})(\text{OH})\text{OP}(\text{O})(\text{OH})_2]$  (koordynacyjnie)
27.  $(\text{HBO}_2)_n$  (tradycyjnie) lub  $-(\text{B}(\text{OH})\text{O})_n-$  (koordynacyjnie)

### IR-4.4.3.3 Związki łańcuchowe

W przypadku związków łańcuchowych zawierających trzy lub więcej różnych pierwiastków, kolejność symboli atomowych we wzorze powinna być raczej zgodna z kolejnością, według której atomy wiążą się w danej cząsteczce lub jonie niż z porządkiem alfabetycznym lub kolejnością wynikającą z elektroujemności. Jeśli jednak chciałoby się przedstawić związek formalnie jako związek koordynacyjny, (t.j. w powiązaniu z dyskusją o addytywnym sposobie nazywania związku), można używać wzoru podanego poniżej w *Przykładzie 1*.

Przykłady:

1.  $\text{NCS}^-$  lub  $\text{SCN}^-$  (*nie*  $\text{CNS}^-$ ) =  $[\text{C}(\text{N})\text{S}]^-$ , nitrido sulfido węglan(-1)
2.  $\text{BrSCN}$  (*nie*  $\text{BrCNS}$ )
3.  $\text{HOCN}$  (kwas cyjanowy)
4.  $\text{HNCO}$  (kwas izocyjanowy)

### IR-4.4.3.4 Uogólnione wzory soli

Jeżeli wzór związku zawierającego trzy lub więcej pierwiastków nie jest zapisany jak podano w dwóch poprzednich sekcjach, związek może być traktowany jak sól uogólniona. Tego terminu używa się dla każdego związku, w którym możliwe jest zidentyfikowanie przynajmniej jednego składnika, może być sklasyfikowany jako elektrododatni lub bardziej elektrododatni niż inne składniki, oraz przynajmniej jednego składnika, który może być sklasyfikowany jako elektroujemny lub bardziej elektroujemny niż reszta składników. Reguły kolejności są więc następujące:

- (i) wszystkie elektrododatnie składniki poprzedzają wszystkie elektroujemne składniki
- (ii) w obrębie każdej z dwóch grup składników stosuje się kolejność alfabetyczną

Przykłady:

1.  $\text{KMgF}_3$
2.  $\text{MgCl}(\text{OH})$
3.  $\text{FeO}(\text{OH})$
4.  $\text{Na Tl}(\text{NO}_3)_2$
5.  $\text{Li}[\text{H}_2\text{PO}_4]$
6.  $\text{NaNH}_4[\text{HPO}_4]$
7.  $\text{Na}[\text{HPO}_3]$
8.  $\text{CuK}_5\text{Sb}_2$  lub  $\text{K}_5\text{CuSb}_2$
9.  $\text{K}_5[\text{CuSb}_2]$
10.  $\text{H}[\text{AuCl}_4]$
11.  $\text{Na}(\text{UO}_2)_3[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{O}_2\text{CMe})_9$

Pierwszy wzór w Przykładzie 8 wynika z założenia, że K i Cu są składnikami elektrododatnimi a Sb - elektroujemnym, drugi wzór zakłada, że K jest składnikiem elektrododatnim a Cu i Sb –

elektroujemnym. Wzory te nie zawierają żadnych informacji strukturalnych. Natomiast wzór w przykładzie 9 zakłada obecność jednostki koordynacyjnej  $[\text{CuSb}_2]^{5-}$ .

Odejście od kolejności alfabetycznej składników w tej samej klasie jest dozwolone, w celu podkreślenia podobieństwa związków.

Przykłady:

12.  $\text{CaTiO}_3$  i  $\text{ZnTiO}_3$  (raczej niż  $\text{TiZnO}_3$ )

Niektóre uogólnione sole mogą być traktowane jak związki addycyjne, patrz IR-4.4.3.5

#### IR-4.4.3.5 Związki (formalnie) addycyjne

We wzorach związków addycyjnych lub związkach, które mogą być formalnie rozważane jako takie, do których należą klatraty i sole wielokrotne, wzory cząsteczek lub jednostek składowych wymieniane są w kolejności wzrastającej ich liczby. Jeżeli występują w takiej samej liczbie wymieniane są w porządku alfabetycznym wg. IR-4.4.2.2. W związkach addycyjnych zawierających wodę zwyczajowo wymienia się ją na końcu. Natomiast związki składowe zawierające bor nie są już traktowane jak wyjątki.

Przykłady:

1.  $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
2.  $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
3.  $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot \text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 24\text{H}_2\text{O}$
4.  $\text{AlCl}_3 \cdot 4\text{EtOH}$
5.  $8\text{H}_2\text{S} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$
6.  $\text{C}_6\text{H}_6 \cdot \text{NH}_3 \cdot \text{Ni}(\text{CN})_2$
7.  $\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
8.  $\text{BF}_3 \cdot 2\text{MeOH}$

#### IR-4.4.4 Skrótly stosowane dla ligandów

Ponieważ skrótly są szeroko stosowane w literaturze chemicznej, ich używanie jest celowe. Niniejszy Dział dostarcza informacji o sposobie wyboru skrótów dla ligandów w celu zastosowania ich we wzorach związków koordynacyjnych (IR-9.2.3.4). Niektóre ogólnie stosowane skrótly są zestawione w Tabeli VII a diagramy większości ligandów są pokazane w Tabeli VIII.

Skrótly ligandów organicznych powinny być zgodne z aktualnymi zasadami systematycznej nomenklatury związków organicznych.<sup>4</sup> (Dla niektórych ligandów w Tabeli VII podano niesystematyczną nazwę jeśli była źródłem skrótlu i jeśli ten skrót jest nadal powszechnie stosowany). Nowe skrótly powinny w przyszłości być konstruowane zgodnie z poniższymi zaleceniami:

- (i) Skrótly ligandów powinny być konstruowane w taki sposób, aby uniknąć nieporozumień. Skrót powinien być wytłumaczony, jeżeli jest stosowany pierwszy raz w publikacji.
- (ii) Nie powinno się sugerować nowych znaczeń dla skrótów lub akronimów mających powszechnie zaakceptowane znaczenie, np. DNA, NMR, ESR, HPLC, Me (dla metylu), Et (dla etylu), itd.

- (iii) Skrót powinien wprost sugerować nazwę (w jęz.ang), np. „ida” dla iminodioctanu (*iminodiacetato*) (Nazwy ligandów mogą naruszać reguły nazewnictwa, gdy te są modyfikowane, na przykład iminodioctan będzie zastąpiony przez dioctan azanodiyłu w odnośniku 4, lecz skróty ligandów nie muszą być zmieniane za każdą zmianą reguł nazewnictwa.)
- (iv) Skróty powinny być możliwie krótkie, lecz powinny zawierać więcej niż jedną literę lub symbol.
- (v) Nie zaleca się stosowania niesystematycznych nazw dla tworzenia nowych skrótów ligandów.
- (vi) Dla skrótów powinno się stosować małe litery, z kilkoma od dawna ustalonymi wyjątkami:
  - (a) skróty dla alkilu, arylu i podobnych grup posiadają pierwszą literę dużą a pozostałe litery małe, np. Me (dla metylu), Ac (dla acetylu), Cp (dla cyklopentadienyłu), itd.;
  - (b) skróty zawierające symbol atomu, np. [12]aneS<sub>4</sub>;
  - (c) skróty zawierające cyfry rzymskie, np. H<sub>2</sub>ppIX dla protoporfiryny IX
  - (d) skróty ligandów zawierających łatwo usuwalne hydrony (patrz vii).

(N.B. Skróty dla rozpuszczalników, które zachowują się jak ligandy, powinny także być pisane małymi literami [np. dmsO dla dimetylosulfotlenku, thf dla tetrahydrofuranu], natomiast stanowczo nie zaleca się używania dużych liter dla skrótów oznaczających rozpuszczalniki, które nie zachowują się jak ligandy.

- (vii) Uwodornienie ligandów anionowych, np. ida, daje kwasy, których skróty mogą być tworzone przez dodanie H, np. Hida, H<sub>2</sub>ida.
- (viii) Ligandy, które są normalnie obojętne, lecz nadal zachowują się jak ligandy tracąc jeden lub więcej atomów wodoru, zyskują skróty przez dodanie -1H, -2H, itd. (włączając cyfrę 1) po normalnym skrócie liganda. Na przykład, jeśli Ph<sub>2</sub>PCH<sub>2</sub>PPh<sub>2</sub> (dppm) traci jeden atom wodoru dając [Ph<sub>2</sub>PCHPPh<sub>2</sub>]<sup>-</sup>, jego skrót jest następujący: dppm-1H, jeśli traci dwa atomy wodoru jego skrótem jest: dppm-2H, itd.

## IR-4.5 Związki modyfikowane izotopowo

### IR-4.5.1 Ogólne zasady

Liczbę masową każdego określonego nuklidu można wskazać w zwykły sposób za pomocą lewego górnego wskaźnika przed odpowiednim symbolem atomowym. (patrz IR-3.2).

Kiedy zachodzi potrzeba podania różnych nuklidów w tym samym położeniu we wzorze, symbole nuklidu pisze się w porządku alfabetycznym; gdy zaś symbole atomowe są identyczne, ustala się je według wzrastającej liczby masowej. Izotopowo modyfikowane związki można podzielić na związki *podstawione izotopowo* i związki *znaczone izotopowo*.

### IR-4.5.2 Związki podstawione izotopowo

Związek podstawiony izotopowo ma skład taki, że wszystkie cząsteczki związku mają jedynie wskazany nuklid (nuklidy) w danej pozycji. Podstawione nuklidy zaznacza się przez podanie liczb masowych jako lewych górnych wskaźników, poprzedzających symbole odpowiednich atomów we wzorze.

Przykłady:

1.  $\text{H}^3\text{HO}$
2.  $\text{H}^{36}\text{Cl}$
3.  $^{235}\text{UF}_6$
4.  $^{42}\text{KNa}^{14}\text{CO}_3$
5.  $^{32}\text{PCl}_3$
6.  $\text{K}[^{32}\text{PF}_6]$
7.  $\text{K}_3^{42}\text{K}[\text{Fe}(^{14}\text{CN})_6]$

### IR-4.5.3 Związki znaczone izotopowo

#### IR-4.5.3.1 Rodzaje znakowania

Związek znaczone izotopowo można formalnie uważać za mieszaninę związku izotopowo nie zmodyfikowanego i jednego lub więcej analogów związków izotopowo podstawionych. Związki znaczone można podzielić na kilka różnych grup. Związki znaczone specyficznymi i związki znaczone selektywnie są opisane skrótowo poniżej, a szerzej - w Ref.5

#### IR-4.5.3.2 Związki znaczone selektywnie

Izotopowo znaczonego związku nazywa się związkiem specyficznie znaczonego, jeżeli dany, izotopowo podstawiony związek doda się formalnie do izotopowo nie zmodyfikowanego, analogicznego związku. Specyficznie znaczonego związek zaznacza się, zamykając symbol (symbole) odpowiedniego nuklidu (nuklidów) wraz ze wskaźnikiem wielokrotności (o ile taki występuje) w nawiasach kwadratowych.

Przykłady:

1.  $\text{H}[^{36}\text{Cl}]$
2.  $[^{32}\text{P}]\text{Cl}_3$
3.  $[^{15}\text{N}]\text{H}_2[\text{H}^2]$
4.  $[^{13}\text{C}]\text{O}[^{17}\text{O}]$
5.  $[^{32}\text{P}]\text{O}[^{18}\text{F}_3]$
6.  $\text{Ge}[^2\text{H}_2]\text{F}_2$

#### IR-4.5.3.3 Związki znaczone selektywnie

Selektywnie znaczonego związek można uważać za mieszaninę związków znaczonego specyficznie. Zapisuje się go podając przed wzorem związku symbol (symbole) nuklidu poprzedzony przez wszystkie konieczne lokanty (bez zwielokrotniających dolnych indeksów), zamknięty w nawiasach kwadratowych.

Przykłady:

1.  $[^{36}\text{Cl}]\text{SOCl}_2$
2.  $[^2\text{H}]\text{PH}_3$
3.  $[^{10}\text{B}]\text{B}_2\text{H}_5\text{Cl}$

Liczbę możliwych znaczonego atomów w określonym położeniu można wskazać za pomocą dolnych wskaźników oddzielonych średnikami, które dodaje się do symbolu (symboli) atomu (atomów) w deskrypcji izotopowej.

Przykład:



## IR-4.6 Możliwe modyfikatory wzorów

### IR-4.6.1 Stopień utlenienia

Stopień utlenienia pierwiastka wskazuje się we wzorze stosując cyfry rzymskie, umieszczone jako prawy, górny wskaźnik. Zerowy stopień utlenienia może być przedstawiany za pomocą cyfry 0 lecz zazwyczaj nie jest stosowany. Jeśli pierwiastek w tym samym wzorze występuje na kilku różnych stopniach utlenienia, to powtarza się symbol pierwiastka i każdemu symbolowi przypisuje się odpowiednią liczbę w kolejności rosnącej.

Przykłady:

1.  $[\text{P}^{\text{V}}_2\text{Mo}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$
2.  $\text{K}[\text{Os}^{\text{VIII}}(\text{N})\text{O}_3]$
3.  $[\text{Mo}^{\text{V}}_2\text{Mo}^{\text{VI}}_4\text{O}_{18}]^{2-}$
4.  $\text{Pb}^{\text{II}}_2\text{Pb}^{\text{IV}}\text{O}_4$
5.  $[\text{Os}^0(\text{CO})_5]$
6.  $[\text{Mn}^{-1}(\text{CO})_5]^-$

Jeśli określenie stopnia utlenienia każdego składnika grupy (lub klastra) jest niemożliwe, zaleca się stosowanie ogólnego stopnia utlenienia grupy przez podanie formalnego ładunku jonowego w sposób przedstawiony w IR-4.3. Pozwala to wyeliminować ułamkowe stopnie utlenienia.

Przykłady:

7.  $\text{O}_2^-$
8.  $\text{Fe}_4\text{S}_4^{3+}$

### IR-4.6.2 Wzory rodników

Rodnik jest to atom lub cząsteczka z jednym lub większą liczbą niesparowanych elektronów. Może mieć ładunek dodatni, ujemny lub zerowy. Niesparowany elektron może być zaznaczony we wzorze za pomocą kropki umieszczonej jako prawy górny wskaźnik przy symbolu chemicznym w taki sposób, aby nie zakłócać wskazań liczby masowej, liczby atomowej lub składu. W przypadku dirodników itd, kropka w prawej górnej pozycji poprzedzona jest wskaźnikiem wielokrotności. Kropka wskazująca rodnik, wraz ze wskaźnikiem wielokrotności, poprzedza każdy ładunek. Aby uniknąć niejednoznaczności, wskaźnik wielokrotności wraz z kropką umieszcza się w nawiasach okrągłych.

Metale i ich jony lub jednostki koordynacyjne często posiadają niesparowane elektrony, lecz, zgodnie z konwencją, nie są uważane za rodniki i we wzorach nie używa się kropek wskazujących rodnik. Może się zdarzyć, że ligand będący rodnikiem, jest związany z metalem lub jego jonem, wtedy wskazane jest użycie kroпки.

Przykłady:

1.  $\text{H}^\bullet$
2.  $\text{HO}^\bullet$
3.  $\text{NO}_2^\bullet$

4.  $O_2^{2\bullet}$
5.  $O_2^{\bullet-}$
6.  $BH_3^{\bullet+}$
7.  $PO_3^{\bullet 2-}$
8.  $NO^{(2\bullet)-}$
9.  $N_2^{(2\bullet)2+}$

### IR-4.6.3 Wzory związków optycznie czynnych

Znak skręcalności optycznej umieszcza się w nawiasie, a długość fali (w nm) jako prawy dolny wskaźnik. Cały symbol umieszcza się przed wzorem i odnosi się do linii D sodu, o ile nie podano inaczej.

Przykład:

1.  $(+)_{589} [Co(en)_3]Cl_3$

### IR-4.6.4 Wskazanie stanów wzbudzenia

Elektronowe stany wzbudzone można zaznaczyć umieszczając gwiazdkę jako prawy górny wskaźnik. Ten sposób zaznaczania nie odróżnia poszczególnych stanów wzbudzenia.

Przykłady:

1.  $He^*$
2.  $NO^*$

### IR-4.6.5 Deskryptory strukturalne

Deskryptory strukturalne, takie jak *cis*, *trans*, *i in.*, zebrano w Tabeli V. Zazwyczaj tego typu deskryptory zapisuje się kursywą i łączy ze wzorem za pomocą łącznika.

Przykłady:

1. *cis*- $[PtCl_2(NH_3)_2]$
2. *trans*- $[PtCl_4(NH_3)_2]$

Deskryptor  $\mu$  oznacza atom lub grupę mostkową centra koordynacyjnego.

Przykład:

3.  $[(H_3N)_5Cr(\mu-OH)Cr(NH_3)_5]^{5+}$

### IR-4.7 Literatura

1. To jest tak zwana kolejność Hilla. Patrz E.A. Hill, *J. Am. Chem. Soc.*, 22, 478-494 (1900).
2. Dla związków międzymetalicznych, wcześniejsze rekomendacje zalecały raczej kolejność alfabetyczną niż na podstawie elektroujemności (patrz I-4.6.6 w *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publication, Oxford, 1990).

3. Kolejność B i C we wzorach była niekonsekwentna w *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publication, Oxford, 1990.
4. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendation*, eds. W.H. Powell and H. Favre, Royal Society of Chemistry, w przygotowaniu.
5. Rozdział II w *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendation 2000*. eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001. (Czerwona książka II)

## **IR-5 Nomenklatura według składu oraz przegląd nazw jonów i rodników**

### **SPIS TREŚCI:**

#### **IR-5.1 Wprowadzenie**

#### **IR-5.2 Nazwy stechiometryczne pierwiastków i związków binarnych**

#### **IR-5.3 Nazwy jonów i rodników**

##### **IR-5.3.1 Informacje ogólne**

##### **IR-5.3.2 Kationy**

###### **IR-5.3.2.1 Informacje ogólne**

###### **IR-5.3.2.2 Kationy monoatomowe**

###### **IR-5.3.2.3 Kationy homopoliatomowe**

###### **IR-5.3.2.4 Kationy heteropoliatomowe**

##### **IR-5.3.3 Aniony**

###### **IR-5.3.3.1 Przegląd**

###### **IR-5.3.3.2 Aniony monoatomowe**

###### **IR-5.3.3.3 Aniony homopoliatomowe**

###### **IR-5.3.3.4 Aniony heteropoliatomowe**

#### **IR-5.4 Uogólnione nazwy stechiometryczne**

##### **IR-5.4.1 Kolejność wymieniania składników elektroujemnych i elektrododatnich**

##### **IR-5.4.2 Oznaczanie proporcji składników**

###### **IR-5.4.2.1 Stosowanie przedrostków zwielokrotniających**

###### **IR-5.4.2.2 Stosowanie ładunków i stopni utlenienia**

###### **IR-5.4.2.3 Składniki monoatomowe a homopoliatomowe**

#### **IR-5.5 Nazwy związków addycyjnych (formalnych)**

#### **IR-5.6 Podsumowanie**

#### **IR-5.7 Przypisy**

### **IR.-5.1 WPROWADZENIE:**

Nomenklatura według składu (nomenklatura składu) jest formalnie oparta na składzie, nie na strukturze, i może być (jedynym) wyborem, gdy dostępnych jest niewiele lub brak jest informacji strukturalnych, lub gdy ma być przekazane minimum informacji strukturalnych.

Najprostszym typem nazwy składu jest nazwa stechiometryczna, która jest po prostu odzwierciedleniem wzoru empirycznego (Sekcja IR-4.2.1) lub wzoru cząsteczkowego (Sekcja IR-4.2.2) związku. W nazwach stechiometrycznych proporcje składników mogą być wskazane



na kilka sposobów, używając przedrostków zwielokrotniających, stopni utlenienia lub ładunków.

W niektórych przypadkach związek chemiczny może być traktowany jako złożony ze składników, którym samym w sobie można nadać nazwy różnych typów (włączając nazwy stechiometryczne). Ogólna nazwa związku jest następnie tworzona z nazw składników tak, aby wskazać ich proporcje. Jedną kategorią takich nazw składu są uogólnione nazwy stechiometryczne (patrz Sekcja IR-5.4), w których różne człony mogą same w sobie być nazwami jonów monoatomowych i poliatomowych. Z tego powodu została tu włączona Sekcja IR-5.3 poświęcona nazewnictwu jonów. Inna kategoria obejmuje nazwy utworzone dla związków addycyjnych, które mają własny format, opisany w Sekcji IR-5.5.

## IR-5.2 NAZWY STECHIOMETRYCZNE PIERWIASTKÓW I ZWIĄZKÓW BINARNYCH

Czysto stechiometryczna nazwa nie niesie żadnej informacji o strukturze nazywanego związku. W najprostszym przypadku nazywany związek składa się tylko z jednego pierwiastka, a nazwa jest tworzona przez dodanie odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego do nazwy pierwiastka (np.  $S_8$ , oktasiarka). Ten przypadek jest szczegółowo omówiony w Sekcji IR-3.4.3. Przy tworzeniu nazwy stechiometrycznej związku binarnego jeden pierwiastek jest wyznaczany jako składnik elektrododatni, a drugi jako elektroujemny. Składnikiem elektrododatnim jest zgodnie z konwencją pierwiastek, który występuje dalej w kolejności przedstawionej w Tabeli VI, a jego nazwa jest nazwą pierwiastka odmienioną w dopełniaczu (Tabela I). Nazwa składnika elektroujemnego jest tworzona z nazwy pierwiastka poprzez dodanie końcówki „-ek”, co wyjaśniono szczegółowo dla anionów monoatomowych w Sekcji IR-5.3.3.2. Wszystkie nazwy pierwiastków z końcówką „-ek” (z uwzględnieniem alternacji morfonologicznych) są podane w Tabeli IX.

Następnie nazwa stechiometryczna związku jest tworzona przez połączenie nazwy składnika elektroujemnego (wymienianego jako pierwszy) z nazwą składnika elektrododatniego, przy czym obie nazwy są odpowiednio uzupełnione niezbędnymi przedrostkami zwielokrotniającymi („mono-”, „di-”, „tri-”, „tetra-”, „penta-”, itd., podanymi w Tabeli IV). Przedrostki zwielokrotniające poprzedzają nazwy, których dotyczą, i są łączone bezpośrednio z nimi bez spacji czy łączników. Pierwsze samogłoski przedrostków zwielokrotniających nie powinny być pomijane. Obie części nazwy są oddzielone spacją.

Nazwy stechiometryczne mogą odpowiadać wzorowi empirycznemu lub wzorowi cząsteczkowemu różniącemu się od wzoru empirycznego (porównaj Przykłady 3 i 4 poniżej).

Przykłady:

- |                                     |  |
|-------------------------------------|--|
| 1. HCl                              | chlerek wodoru                           |
| 2. NO                               | tlenek azotu, lub monotlenek azotu       |
| 3. NO <sub>2</sub>                  | ditlenek azotu                           |
| 4. N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>    | tetratlenek diazotu                      |
| 5. OCl <sub>2</sub>                 | dichlorek tlenu                          |
| 6. O <sub>2</sub> Cl                | chlerek ditlenu                          |
| 7. Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>   | tetratlenek diżelaza                     |
| 8. SiC                              | węglik krzemu                            |
| 9. SiCl <sub>4</sub>                | tetrachlorek krzemu                      |
| 10. Ca <sub>3</sub> P <sub>2</sub>  | difosforek triwapnia lub fosforek wapnia |
| 11. NiSn                            | cynek niklu                              |
| 12. Cu <sub>5</sub> Zn <sub>8</sub> | oktacynekk pentamiedzi                   |
| 13. Cr <sub>23</sub> C <sub>6</sub> | heksawęglik trikozachromu                |

Przedrostki zwielokrotniające nie muszą być używane w nazwach związków binarnych, jeśli nie ma wątpliwości co do stechiometrii związku (tak jak w Przykładzie 10 powyżej). Przedrostek "mono-" jest zwyczajnie zbędny i używa się go tylko do podkreślenia stechiometrii podczas omawiania związków o podobnym składzie, tak jak w Przykładach 2, 3 i 4 powyżej. Alternatywnie proporcje składników mogą być wskazane poprzez użycie stopni utlenienia lub liczb ładunku (Sekcja IR-5.4.2). Dla związków zawierających więcej niż dwa pierwiastki wymagane są dodatkowe zasady do tworzenia nazwy składu (patrz Sekcje IR-5.4 i IR-5.5).

## IR-5.3 NAZWY JONÓW I RODNIKÓW

### IR-5.3.1 Informacje ogólne

Ładunki atomów nie muszą być określone w nazwie stechiometrycznej. Jednak w wielu przypadkach wiadomo, że atomy lub grupy atomów noszą określony ładunek. W nomenklaturze składu nazwa związku może zawierać nazwy pojedynczych jonów utworzonych poprzez nazwy stechiometryczne lub zgodnie z innymi zasadami, jak opisano poniżej.

### IR-5.3.2. Kationy

#### IR-5.3.2.1 Informacje ogólne

Kation to monoatomowe lub poliatomowe indywiduum chemiczne posiadające jeden lub więcej ładunków dodatnich. Ładunek na kationie może być wskazany w nazwie poprzez użycie liczby ładunku lub, w przypadku kationów nazywanych addytywnie, poprzez stopień utlenienia atomu centralnego lub atomów centralnych. Liczby utlenienia i liczby ładunku są omówione w Sekcji IR-5.4.2.2.

#### IR-5.3.2.2 Kationy monoatomowe

Nazwy kationów monoatomowych tworzy się rozpoczynając od słowa „kation”, po którym występuje nazwa pierwiastka odmieniona w dopełniaczu z odpowiednią liczbą ładunku podaną w nawiasach. Niesparowane elektrony w kationach monoatomowych mogą być oznaczone za pomocą kropki rodnikowej, tj. kropki umieszczonej centralnie przed ładunkiem, poprzedzonej liczbą jeśli jest to konieczne.

Przykłady:

- |                                |                                |
|--------------------------------|--------------------------------|
| 1. $\text{Na}^+$               | kation sodu(1+)                |
| 2. $\text{Cr}^{3+}$            | kation chromu(3+)              |
| 3. $\text{Cu}^+$               | kation miedzi(1+)              |
| 4. $\text{Cu}^{2+}$            | kation miedzi(2+)              |
| 5. $\text{I}^+$                | kation jodu(1+)                |
| 3. $\text{H}^+$                | kation wodoru(1+), hydron      |
| 4. $^1\text{H}^+$              | kation protu(1+), proton       |
| 5. $^2\text{H}^+$              | kation deuteru(1+), deutron    |
| 6. $^3\text{H}^+$              | kation trytu(1+), tryton       |
| 7. $\text{He}^{\bullet+}$      | kation helu( $\bullet$ 1+)     |
| 8. $\text{O}^{\bullet+}$       | kation tlenu( $\bullet$ 1+)    |
| 9. $\text{N}_2^{(2\bullet)2+}$ | kation diazotu( $2\bullet$ 2+) |

Nazwy izotopów wodoru są omówione w Sekcji IR-3.3.2.

#### IR-5.3.2.3 Kationy homopoliatomowe

Nazwy kationów homopoliatomowych tworzy się rozpoczynając od słowa „kation”, po którym występuje nazwa pierwiastka odmieniona w dopełniaczu z odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym z odpowiednią liczbą ładunku podaną w nawiasach. Ponownie, dla zaznaczenia niesparowanych elektronów mogą być dodane kropki rodnikowe.

Przykłady:

1.  $O_2^+$  lub  $O_2^{\bullet+}$  kation ditlenu(1+) lub kation ditlenu( $\bullet$ 1+)
2.  $S_4^{2+}$  kation tetrasiarki(2+)
3.  $Hg_2^{2+}$  kation dirtęci(2+)
4.  $Bi_5^{4+}$  kation pentabizmutu(4+)
5.  $H_3^+$  kation triwodoru(1+)

#### IR-5.3.2.4 Kationy heteropoliatomowe

Nazwy kationów heteropoliatomowych tworzy się rozpoczynając się od słowa „kation”, a następnie dodając do niego przymiotnikową formę nazwy utworzonej metodą podstawnikową (patrz Sekcja IR-6.4) lub nazwę addytywną odmienioną w dopełniaczu (patrz Rozdział IR-7). Nazwy podstawnikowe nie wymagają podawania liczby ładunkowej, ponieważ sama nazwa wskazuje ładunek (jak w Przykładach 2 i 4 poniżej). Do nazw addytywnych można dodawać kropki rodnikowe dla oznaczenia obecności niesparowanych elektronów. Niektóre kationy mają utrwalone i wciąż akceptowalne nazwy niesystematyczne.

Przykłady:

1.  $NH_4^+$  kation azaniowy (nazwa podstawnikowa) lub kation amonowy/amoniowy (dopuszczalne nazwa zwyczajowa)
2.  $H_3O^+$  kation oksydanowy (nazwa podstawnikowa) lub kation oksoniowy (dopuszczalna nazwa zwyczajowa; *nie*: hydroniowy)
3.  $PH_4^+$  kation fosfaniowy (nazwa podstawnikowa)
4.  $H_2O^{2+}$  kation oksydandiowy (nazwa podstawnikowa)
5.  $SbF_4^+$  kation tetrafluorostibaniowy (nazwa podstawnikowa) lub kation tetrafluoridoantymonu(1+)/tetrafluoridoantymonu(V) (obie nazwy addytywne)
6.  $BH_3^{\bullet+}$  kation boraniowy (nazwa podstawnikowa) lub lub kation trihydridoboru( $\bullet$ 1+) (nazwa addytywna)

Wiecej przykładów podano w Tabeli IX.

### IR-5.3. Aniony

#### IR-5.3.3.1 Informacje ogólne

Anion to monoatomowe lub poliatomowe indywiduum chemiczne posiadające jeden lub więcej ładunków ujemnych. Ładunek anionu może być wskazany w nazwie poprzez użycie liczby ładunku lub, w przypadku anionów nazywanych addytywnie, poprzez stopień utlenienia atomu centralnego lub atomów centralnych. Stopnie utlenienia i liczby ładunku są omówione w Sekcji

IR-5.4.2.2. Końcówki stosowane w nazwach anionów to: „-ek” (dla anionów monoatomowych lub homopoliatomowych), „-an” (dla anionów heteropoliatomowych nazywanych addytywnie) oraz „-yn” (używany w kilku nazwach, które są wciąż akceptowalne, ale nie wywodzą się z aktualnej nomenklatury systematycznej). Gdy nie ma wątpliwości liczba ładunku może być pominięta, tak jak w Przykładzie 1 poniżej. Nazwy oparte na wodorkach macierzystych nie wymagają liczb ładunku, ponieważ sama nazwa go wskazuje (Przykłady 3 i 4 poniżej).

Przykłady:

1.  $\text{Cl}^-$  chlorek(1-) lub chlorek
2.  $\text{S}_2^{2-}$  disiarczek(2-)
3.  $\text{PH}_2^-$  fosfanek
4.  $\text{PH}^{2-}$  fosfandiek
5.  $[\text{CoCl}_4]^{2-}$  tetrachloridokobaltan(2-) lub tetrachloridokobaltan(II)
6.  $\text{NO}_2^-$  dioksidoazotan(1-) lub azotyn

#### IR-5.3.3.2 Aniony monoatomowe

Nazwę anionu monoatomowego tworzy się poprzez modyfikację nazwy pierwiastka (Tabela I) tak, aby zawierała końcówkę "-ek". Można to zrobić na dwa sposoby: przez bezpośrednie dodanie końcówki "-ek" do nazwy pierwiastka, albo przez dodanie końcówki „-ek” lub poprzedzone alternacją morfonologiczną końcówki nazwy pierwiastka.

Przykłady:

1. chlor, chlorek
2. ksenon, ksenonek
3. wolfram, wolframek
4. bizmut, bizmutek
5. sód, sodek
6. potas, potasek
7. węgiel, węgiel (jedeny wyjątek z końcówka „-ik” ).

Wszystkie nazwy anionów monoatomowych zostały zebrane w Tabeli IX.

W celu dokładniejszego przedstawienia anionów można dodać odpowiednie liczby ładunku oraz kropki rodnikowe.

Przykłady

8.  $\text{O}^{2-}$  tlenek(2-) lub tlenek
9.  $\text{O}^{\bullet-}$  tlenek( $\bullet$ 1-)
10.  $\text{N}^{3-}$  azotek(3-) lub azotek

#### IR-5.3.3.3 Aniony homopoliatomowe

Aniony homopoliatomowe nazywa się poprzez dodanie odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego do nazwy anionu utworzonej analogicznie jak w przypadku anionów monoatomowych (patrz Podrozdział 5.3.3.2). Do tak utworzonej nazwy obligatoryjnie dodaje się liczbę ładunku. W razie potrzeby można również dodać kropkę rodnikową. W niektórych przypadkach akceptowalne są wciąż nazwy niesystematyczne.

Przykłady:

	Nazwa systematyczna	Dopuszczalna nazwa alternatywna
1. $O_2^-$ lub $O_2^{\bullet-}$	ditlenek(1-) lub ditlenek( $\bullet$ 1-)	ponadtlenek
2. $O_2^{2-}$	diotlenek(2-)	nadtlenek
3. $O_3^-$	tritlenek(1-)	ozonek
4. $I_3^-$	trijodek(1-)	
5. $Cl_2^{\bullet-}$	dichlorek( $\bullet$ 1-)	
6. $C_2^{2-}$	diwęglik(2-)	acetylek
7. $N_3^-$	triazotek(1-)	azydek
8. $S_2^{2-}$	disiarczek(2-)	
9. $Sn_5^{2-}$	pentacynek(2-)	
10. $Pb_9^{4-}$	nonałowek(4-)	

W niektórych przypadkach aniony homopoliatomowe można traktować jako pochodzące od wodorku macierzystego poprzez usunięcie jonów wodoru (patrz Sekcja IR-6.4).

Przykłady:

- |                |               |
|----------------|---------------|
| 11. $O_2^{2-}$ | dioksydandiek |
| 12. $S_2^{2-}$ | disulfandiek  |

#### IR-5.3.3.4 Aniony heteropoliatomowe

Aniony heteropoliatomowe są zwykle nazywane albo metodą podstawnikową (patrz Sekcja IR-6.4.4), albo metodą addytywną (patrz Rozdział IR-7 i Sekcja IR-9.2.2). Do nazw addytywnych można dodawać kropki rodnikowe w celu zaznaczenia obecności niesparowanych elektronów. Niektóre aniony heteropoliatomowe mają utrwalone i wciąż akceptowalne nazwy niesystematyczne.

Przykłady:

- |                       |   |
|-----------------------|---|
| 1. $NH_2^-$           | azanek (podstawnikowa), dihydridoazotan(1-) (addytywna) lub amid (dopuszczalna nazwa niesystematyczna)        |
| 2. $GeH_3^-$          | germanek (podstawnikowa) lub trihydridogermanian(1-) (addytywna)  |
| 3. $HS^-$             | sulfanek (podstawnikowa) lub hydrosiarczan(1-) (addytywna)  |
| 4. $H_3S^-$           | sulfanuid lub $\lambda^4$ -sulfanek (obie podstawnikowe) lub trihydridoosiarczan(1-) (addytywna)              |
| 5. $H_2S^-$           | sulfanuidyl lub $\lambda^4$ -sulfanidyl (obie podstawnikowe) lub dihydridosiarczan( $\bullet$ 1-) (addytywna) |
| 6. $SO_3^{2-}$        | trioksidosiarczan(2-) (addytywna) lub siarczyn (dopuszczalna nazwa niesystematyczna)                          |
| 7. $OCl^-$            | chloridotlenian(1-) (addytywna) lub podchloryn (dopuszczalna nazwa niesystematyczna)                          |
| 8. $ClO_3^-$          | trioksidochloran(1-) (addytywna) lub chloran (dopuszczalna nazwa niesystematyczna)                            |
| 9. $[PF_6]^-$         | heksafluoro- $\lambda^5$ -fosfanuid (podstawnikowa) lub heksafluoridofosforan(1-) (addytywna)                 |
| 10. $[CuCl_4]^{2-}$   | tetrachloridomiedzian(II) (addytywna)   |
| 11. $[Fe(CO)_4]^{2-}$ | tetrakarbonyloželazian(-II) (addytywna)   |

Wszystkie dopuszczalne nazwy niesystematyczne anionów są podane w Tabeli IX.

Należy zauważyć, że w pozycji literutowej 1, aniony rodnikowe składające się wyłącznie z wodoru i jednego innego pierwiastka były nazywane addytywnie z użyciem końcówki '-ek' zamiast końcówki '-an' (np. Przykład 5 powyżej). Odstępowanie od tego wyjątku w ogólnym systemie nomenklatury addytywnej dla tych szczególnych przypadków nie jest już zalecane. Gdy jeden lub więcej wodorów jest przyłączonych do anionu w nieznanych pozycjach, lub w pozycjach, których nie chcemy lub nie musimy określać, można użyć „nazwy wodorowej” (patrz Sekcja IR-8.4). Nazwy takie mogą być również stosowane dla związków podobnych, jak na przykład częściowo odwodornione kwasy tlenowe. Niektóre z tych nazw mają dopuszczalne formy skrócone, takie jak wodorowęglan, diwodorofosforan, itd. Wszystkie dopuszczalne nazwy skrócone są podane w Sekcji IR-8.5.

Przykłady:

- |                                   |  |
|-----------------------------------|--|
| 12. $\text{HMo}_6\text{O}_{19}^-$ | wodoro(nonadekaoksidoheksamolibdenian)(1-)             |
| 13. $\text{HCO}_3^-$              | wodoro(trioksidoowęglan)(1-) lub wodorowęglan          |
| 14. $\text{H}_2\text{PO}_4^-$     | diwodoro(tetraoksidofosforan)(1-) lub diwodorofosforan |

## IR-5.4 UOGÓLNIONE NAZWY STECHIOMETRYCZNE

### IR-5.4.1 Kolejność wymieniań składników elektrododatnich i elektroujemnych

Składniki związku, który ma zostać nazwany, dzieli się formalnie na składniki elektrododatnie i elektroujemne. Musi występować co najmniej jeden składnik elektrododatni i jeden elektroujemny. Kationy są z definicji elektrododatnie, a aniony elektroujemne. Pierwiastkiem elektrododatnim będzie ten, który występuje dalej w kolejności przedstawionej w Tabeli VI.

W zasadzie jeśli związek zawiera więcej niż dwa pierwiastki to podział na składniki elektrododatnie i elektroujemne jest arbitralny. Zazwyczaj jednak nie ma problemu z ustaleniem tego podziału.

Nazwy składników elektroujemnych poprzedzają nazwy składników elektrododatnich w całkowitej nazwie. Kolejność wymieniań w obrębie każdej klasy składników jest alfabetyczna (przedrostki zwielokrotniające są pomijane), z wyjątkiem wodoru, który jest wymieniany jako ostatni wśród składników elektrododatnich, jeśli jest sklasyfikowany jako składnik elektrododatni. Ta zasada tworzenia uogólnionych nazw stechiometrycznych jest równoległa do zasady tworzenia „uogólnionych wzorów soli” w Sekcji IR-4.4.3.4. Jednak kolejność wymieniań w uogólnionej nazwie stechiometrycznej nie musi być taka sama jak kolejność symboli w odpowiadającym uogólnionym wzorze soli, co widać w Przykładach 4, 5 i 7 poniżej.

Poniższe uogólnione nazwy stechiometryczne, oparte wyłącznie na jednopierwiastkowych składnikach, nie niosą informacji o strukturze.

Przykłady:

- |  |   |
|--|---|
| 1. IBr   | bromek jodu   |
| 2. PBrClI  | bromek chlorek jodek fosforu  |
| 3. ArHF lub ArFH   | wodorofluorek argonu lub fluorek wodorek argonu                     |
| 4. ClOF lub OCIF   | fluorek chloru tlenu lub chlorek fluorek tlenu                      |
| 5. $\text{CuK}_5\text{Sb}_2$ lub $\text{K}_5\text{CuSb}_2$ | diantymonek miedzi pentapotasu lub diantymonek miedziek pentapotasu |

Należy zauważyć na podstawie tych przykładów, że kolejność dowolnych dwóch pierwiastków w nazwie zależy od arbitralnego podziału pierwiastków na składniki elektrododatnie i elektroujemne. Ta sama zasada dotyczy kolejności symboli pierwiastków we wzorach, co zilustrowano w Sekcji IR-4.3.3.4. Nazwy addytywne reprezentujące rzeczywistą strukturę związków w Przykładach 3 i 4 (odpowiednio FArH i FCIO) są podane w Sekcji IR-7.2.

W niektórych przypadkach stosowanie nomenklatury podstawnikowej lub addytywnej do nazwania jonu nie jest możliwe lub pożądane z powodu braku informacji strukturalnych. W takich przypadkach najlepiej jest podać nazwę stechiometryczną i dodać liczbę ładunku. Nawiasy są potrzebne, aby jasno wskazać, że liczba ładunku oznacza całkowity ładunek jonu.

Przykład:

6.  $O_2Cl_2^+$  (dichlorek ditlenu)(1+)

Gdy nazwy jonów wieloatomowych występują jako składniki w uogólnionej nazwie stechiometrycznej, pewna ilość informacji strukturalnych jest często zawarta w nazwie.

Przykład:

7.  $NaNH_4[HPO_4]$  wodorofosforan amonu sodu

## 5.4.2 Oznaczanie proporcji składników

### 5.4.2.1 Stosowanie przedrostków zwielokrotniających

Proporcje składników, zarówno monoatomowych jak i poliatomowych, mogą być wskazane w uogólnionych nazwach stechiometrycznych za pomocą przedrostków zwielokrotniających, tak jak to miało miejsce w przypadku związków binarnych (Sekcja IR-5.2).

Przykłady:

1.  $Na_2CO_3$  trioksidowęglan sodu lub węglan sodu
2.  $K_4[Fe(CN)_6]$  heksacyjanidożelazian(II) tetrapotasu
3.  $PCl_3O$  trichlorek tlenek fosforu
4.  $KMgCl_3$  trichlorek magnezu potasu

Gdy nazwa składnika sama w sobie zaczyna się od przedrostka zwielokrotniającego (jak disiarczan, dichromian, trifosforan, tetraboran, itd.), lub gdy mogłaby wystąpić niejednoznaczność, stosuje się alternatywne przedrostki zwielokrotniające 'bis-', 'tris-', 'tetrakis-', 'pentakis-' itd. (Tabela IV), a nazwa grupy, do której odnosi się alternatywny przedrostek, umieszczana jest w nawiasach.

Przykłady:

5.  $Ca(NO_3)_2$  bis(trioxiidoazotan) wapnia lub azotan wapnia
6.  $(UO_2)SO_4$  tetraoksidosiarczan bis(dioksidouranu)
7.  $Ba(BrF_4)$  bis(tetrafluoridobromian) baru
8.  $U(S_2O_7)_2$  bis(disiaraczan) uranu
9.  $Ca_3PO_4$  bis(fosforan) triwapnia
10.  $Ca_2P_2O_7$  difosforan wapnia
11.  $Ca(HCO_3)_2$  bis(wodorowęglan) wapnia

### IR-5.4.2.2 Stosowanie liczb ładunku i stopni utlenienia

Przekazanie informacji o proporcjach składników w nazwach jest możliwe także poprzez użycie jednego z dwóch innych sposobów: liczby ładunku oraz stopnia utlenienia. W nomenklaturze preferowane jest stosowanie liczby ładunku, ponieważ określenie stopnia utlenienia jest czasami niejednoznaczne i subiektywne. Zaleca się stosowanie stopni utlenienia tylko wtedy, gdy nie ma wątpliwości co do ich przypisania.

Liczba ładunku to liczba, której wartość jest równa ładunkowi jonu. Jest zapisywana w nawiasach bezpośrednio po nazwie jonu, bez spacji. Ładunek zapisywany jest cyframi arabskimi, po których następuje znak ładunku. Należy zauważyć, że jedność jest zawsze oznaczana, w przeciwieństwie do oznaczeń ładunku w indeksie górnym (które są stosowane we wzorach). Nie stosuje się liczby ładunku po nazwie obojętnego indywiduum.

Przykłady:

1.  $\text{FeSO}_4$  siarczan żelaza(2+)
2.  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$  siarczan żelaza(3+)
3.  $(\text{UO}_2)_2\text{SO}_4$  siarczan dioksidouranu(1+)
4.  $\text{UO}_2\text{SO}_4$  siarczan dioksidouranu(2+)
5.  $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  heksacyjanożelazian(4-) potasu
6.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{SO}_4)$  chlorek siarczan heksaaminakobaltu(3+)

Stopień utlenienia pierwiastka (patrz Sekcja IR-4.6.1 i IR-9.1.2.8) oznacza się cyfrą rzymską umieszczoną w nawiasach bezpośrednio po nazwie (zmodyfikowanej końcówką 'an' jeśli to konieczne) pierwiastka, którego dotyczy. Stopień utlenienia może być dodatni, ujemny lub zerowy (reprezentowane przez cyfrę 0). Stopień utlenienia jest zawsze nieujemny, chyba że znak minus jest wyraźnie użyty (znak plus nie jest używany). Niecałkowite stopnie utlenienia nie są używane do celów nomenklatury.

Przykłady:

7.  $\text{PCl}_5$  chlorek fosforu(V)
8.  $\text{Na}[\text{Mn}(\text{CO})_5]$  pentakarbonylomanganian(-I) sodu
9.  $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$  pentakarbonyloželazo(0)

Istnieje kilka konwencji stosowanych przy określaniu stopni utlenienia, których użycie jest szczególnie powszechne w nazwach związków pierwiastków przejściowych. Wodór jest traktowany jako dodatni (stopień utlenienia I) w połączeniu z pierwiastkami niemetalicznymi i ujemny (stopień utlenienia -I) w połączeniu z pierwiastkami metalicznymi. Grupy organiczne połączone z atomami metali są traktowane czasami jako aniony (np. ligand metylowy jest zwykle uważany za jon metankowy,  $\text{CH}_3^-$ ), a czasami jako cząsteczki obojętne (np. monotlenek węgla). Wiązania między atomami tego samego pierwiastka nie mają wpływu na stopień utlenienia.

Przykłady:

10.  $\text{N}_2\text{O}$  tlenek azotu(I)
11.  $\text{NO}_2$  tlenek azotu(IV)
12.  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  tlenek żelaza(II) diżelaza(III)
13.  $\text{MnO}_2$  tlenek manganu(IV)
14.  $\text{CO}$  tlenek węgla(II)
15.  $\text{FeSO}_4$  siarczan żelaza(II)
16.  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$  siarczan żelaza(III)
17.  $\text{SF}_6$  fluorek siarki(VI)
18.  $(\text{UO}_2)_2\text{SO}_4$  siarczan dioksidouranu(V)



19. $\text{UO}_2\text{SO}_4$	siarczan dioksidouranu(VI)
20. $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$	heksacyjanidożelazian(II) potasu lub heksacyjanidożelazian(4-) potasu
21. $\text{K}_4[\text{Ni}(\text{CN})_4]$	tetracyjanidoniklan(0) potasu lub tetracyjanidoniklan(4-) potasu
22. $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CO})_4]$	tetrakarbonyloželazian(-II) sodu lub tetrakarbonyloželazian(2-) sodu
23. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}(\text{SO}_4)$	chlerek siarczan heksaaminakobaltu(III) lub chlerek siarczan heksaaminakobaltu(3+)
24. $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3$	heksacyjanidożelazian(II) żelaza(III) lub heksacyjanidożelazian(4-) żelaza(3+)

Należy zauważyć, że stosowanie stopni utlenienia nie jest już zalecane przy nazywaniu jonów homopoliatomowych. Ma to na celu uniknięcie niejednoznaczności. Stopnie utlenienia odnoszą się do pojedynczych atomów danego pierwiastka, nawet jeśli są dołączone do nazwy zawierającej przedrostek zwielokrotniający, por. Przykład 12 powyżej. Zgodnie z tą zasadą, dirtęć(2+) (patrz Sekcja IR-5.3.2.3) musiałaby być nazwana dirtęć(I); ditlenek(2-) (patrz Sekcja IR-5.3.3.3) byłby ditlenkiem(-I); a jony takie jak pentabizmut(4+) (patrz Sekcja IR-5.3.2.3) i ditlenek(1-) (patrz Sekcja IR-5.3.3.3), które miałyby ułamkowe formalne stopnie utlenienia, w ogóle nie mogłyby być nazwane.

#### IR-5.4.2.3 Wielokrotne składniki monoatomowe a składniki homopoliatomowe

Należy zachować ostrożność przy rozróżnianiu pomiędzy wielokrotnymi składnikami monoatomowymi a składnikami poliatomowymi. To rozróżnienie często nie jest widoczne we wzorze, ale jest domyślnie zawarte w nazwie.

Przykłady:

1.  $\text{TlI}_3$  tris(jodek) talu lub jodek talu(III) lub jodek talu(3+)
2.  $\text{Tl}(\text{I}_3)$  trijodek(1-) talu(I) lub trijodek talu(I) lub trijodek talu(1+)

Oba związki w Przykładach 1 i 2 mają ten sam ogólny wzór  $\text{TlI}_3$  i oba mogłyby być nazwane prostą nazwą stechiometryczną „trijodek talu”. Jednakże możliwe jest, a zazwyczaj także i pożądane, aby przekazać w nazwie większą ilość informacji.

Związek w Przykładzie 1 składa się z jodku,  $\text{I}^-$ , i talu w proporcji 3:1, podczas gdy związek w Przykładzie 2 składa się z trijodku(1-),  $\text{I}_3^-$ , i talu w proporcji 1:1. W pierwszej nazwie pierwszego związku przedrostek „tris” jest użyty, aby jednoznacznie wskazać, że mamy do czynienia z trzema jonami jodkowymi, a nie z jednym jonem trijodkowym. Alternatywne nazwy wykorzystują odpowiednio stopień utlenienia III dla talu i liczbę ładunku 3+, aby pośrednio przekazać proporcje składników.

W pierwszej nazwie w Przykładzie 2 jasnym jest, że składnik elektroujemny to homopoliatomowe indywiduum o ładunku -1. Kolejne dwie nazwy przekazują tę informację pośrednio poprzez dodanie stopnia utlenienia lub liczby ładunku do nazwy talu. Umieszczenie nazwy części elektroujemnej w nawiasie podkreśla, że jest to homopoliatomowe indywiduum. Dla obu powyższych związków akceptowalne są w pełni zapisane nazwy zawierające liczby ładunku kationu talu, pomimo iż jest to częściowo zbędne. Dlatego też nazwy tris(jodek) talu(3+) i trijodek(1-) talu(1+) odpowiednio dla Przykładu 1 i 2 mogą być preferowane w kontekstach systematycznych, takich jak indeksy i rejestry.

Przykłady

3.  $\text{HgCl}_2$  dichlorek rtęci lub chlerek rtęci(II) lub chlerek rtęci(2+)
4.  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$  dichlorek dirtęci lub dichlorek (dirtęci) lub chlerek dirtęci(2+)

W przykładzie 4 pierwsza nazwa jest nazwą czysto stechiometryczną, podczas gdy druga nazwa zawiera więcej informacji wskazujących na to, że związek ten składa się z homodiatomowego kationu. W ostatniej nazwie, w której jest podany ładunek dikationu, przedrostek „di-” dla chlorku nie jest konieczny.

Przykłady:

5.  $\text{Na}_2\text{S}_3$  (trisiarczek) disodu (nazwa wskazuje na obecność poliatomowego anionu) lub trisiarczek(2-) sodu (jeśli wyróżniony jest ładunek anionu to nie ma konieczności stosowania przedrostka zwielokrotniającego przed nazwą kationu)
6.  $\text{Fe}_2\text{S}_3$  tris(siarcezek) diżelaza lub siarczek żelaza(III)

Sole, które zawierają aniony będące łańcuchami  $\text{S}_n^{2-}$ , jak również te zawierające kilka anionów  $\text{S}^{2-}$ , są określane jako „polisiarczki”, jednak jak pokazano powyżej, można nadać im nazwy, które pozwalają na ich rozróżnienie.

Przykłady:

7.  $\text{K}_2\text{O}$  tlenek dipotasu
8.  $\text{K}_2\text{O}_2$  (ditlenek) dipotasu lub ditlenek potasu(2-)
9.  $\text{KO}_2$  (ditlenek) monopotasu lub ditlenek potasu(1-)
10.  $\text{KO}_3$  (tritlenek) potasu lub tritlenek potasu(1-)

Prosta nazwa stechiometryczna jak „ditlenek potasu”, choć ściśle mówiąc jednoznaczna (odnosząca się do związku z Przykładu 9), mogłaby zostać łatwo błędnie zinterpretowana. W innych przypadkach, bazując na wiedzy chemicznej, nie ma ryzyka błędnej interpretacji, dlatego najczęściej używana będzie prosta nazwa stechiometryczna, jak w Przykładach 11 i 12 poniżej.

Przykłady:

11.  $\text{BaO}_2$  ditlenek baru (prosta nazwa stechiometryczna) lub (ditlenek) baru(2-) (wskazanie na anion dwuatomowy) lub nadtlenuk baru (dopuszczalna alternatywna nazwa dla anionu)
12.  $\text{MnO}_2$  ditlenek manganu (prosta nazwa stechiometryczna) lub bis(tlenek) manganu (wskazanie na dwa jony tlenkowe zamiast anionu dwuatomowego) lub tlenek manganu(IV)

#### IR-5.5 Nazwy związków (formalnie) addycyjnych

Termin związki addycyjne obejmuje kompleksy donorowo-akceptorowe (addukty) oraz różnorodne związki sieciowe. Metoda opisana znajduje również zastosowanie do soli wielokrotnych oraz pewnych związków o niepewnej strukturze lub związków, dla których nie ma potrzeby przedstawiania pełnej struktury.

Nazwy poszczególnych składników takiego uogólnionego związku addycyjnego są tworzone przy użyciu odpowiedniego systemu nomenklatury, czy to składu, podstawnikowego czy addytywnego. Ogólna nazwa związku jest następnie tworzona poprzez połączenie nazw składników za pomocą myślników. Proporcje składników są wskazywane po nazwie przez deskryptor stechiometryczny składający się z liczb arabskich oddzielonych ukośnikiem lub ukośnikami. Deskryptor zapisany w nawiasie jest oddzielony od nazwy związku spacją. Kolejność nazw poszczególnych składników jest, po pierwsze, zgodna z rosnącą liczbą

składników, a po drugie, alfabetyczna. Jedynym wyjątkiem jest nazwa składnika „woda”, która zawsze jest cytowana jako ostatnia. Należy zauważyć, że stanowi to zmianę w stosunku do reguły z pozycji literaturowej 2, według której nazwy składników muszą być zgodne z kolejnością podaną we wzorze. Liczby w deskryptorze pojawiają się w tej samej kolejności co odpowiadające im nazwy składników.

Dla związków addycyjnych zawierających wodę jako składnik, nazwa klasowa „hydraty” jest dopuszczalna ze względu na ugruntowane zastosowanie. Dla hydratów o prostej stechiometrii akceptowalne są nazwy z użyciem słowa „hydrat”, jednak nie sformułowano reguł dla stechiometrii niecałkowitych, jak to ma miejsce w przykładzie 12 poniżej. Ponadto ze względu na ich niejednoznaczność, nazwy... Terminy 'deuterat' i 'tritiat' nie są akceptowalne dla związków addycyjnych zawierających 2H<sub>2</sub>O i 3H<sub>2</sub>O lub inne izotopowo modyfikowane formy wody. Przykład 3 pokazuje wzór i nazwę związku z modyfikacją izotopową. W tym przypadku zmodyfikowany wzór składnika i jego nazwa są przedstawione zgodnie z regułami Sekcji II-2.3.3 z pozycji literaturowej 3.

Przykłady:

- |   |  |
|---|--|
| 1. BF <sub>3</sub> ·2H <sub>2</sub> O   | trifluorek boru—woda (1/2)                             |
| 2. 8Kr·46H <sub>2</sub> O   | krypton—woda (8/46)                                    |
| 3. 8Kr·46 <sup>3</sup> H <sub>2</sub> O   | krypton—( <sup>3</sup> H <sub>2</sub> )woda (8/46)     |
| 4. CaCl <sub>2</sub> ·8NH <sub>3</sub>  | chlorek wapnia—amoniak (1/8)                           |
| 5. AlCl <sub>3</sub> ·4EtOH   | chlorek glinu—etanol (1/4)                             |
| 6. BiCl <sub>3</sub> ·3PCl <sub>5</sub>   | chlorek bizmutu(III)—chlorek fosforu(V) (1/3)          |
| 7. 2Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>                                     | węglan sodu—nadtlenek wodoru (2/3)                     |
| 8. Co <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ·nH <sub>2</sub> O  | tlenek kobaltu(III)—woda (1/n)                         |
| 9. Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O  | siarczan sodu—woda (1/10) lub siarczan sodu dekahydrat |
| 10. Al <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ·K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·24H <sub>2</sub> O | siarczan glinu—siarczan potasu—woda (1/1/24)           |
| 11. AlK(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·12H <sub>2</sub> O  | bis(siarczan) glinu potasu dodekahydrat                |
| 12. 3CdSO <sub>4</sub> ·8H <sub>2</sub> O   | siarczan kadmu—woda (3/8)                              |

Z punktu widzenia nomenklatury nie ma różnicy między kompleksami donorowo-akceptorowymi a związkami koordynacyjnymi. Dlatego dla takich układów można stosować nazewnictwo addytywne, jak opisano w Sekcjach od IR-7.1 do IR-7.3 oraz w Rozdziale IR-9.

Przykład:

- |  |  |
|--|--|
| 13. BH <sub>3</sub> ·(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> O lub [B{(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> O}H <sub>3</sub> ] | boran—etoksyetan (1/1) lub (etoksyetan)trihydridobor |
|--|--|

W Sekcji P-68.1 z pozycji literaturowej 4 przedstawiono nieco odmienne nazewnictwo dla organicznych kompleksów donorowo-akceptorowych.

## IR-5.6 PODSUMOWANIE

Nazwy składu są typu stechiometrycznego (które ponadto są typu binarnego, z wyjątkiem przypadku idywiduów homoatomowych), albo typu addytywne. Nomenklatura składu jest stosowana, gdy ma być przekazana niewielka ilość informacji strukturalnych lub gdy nie ma potrzeby przekazywania takich informacji. Nomenklatura podstawnikowa lub addytywna może być z kolei stosowana do opisu struktury składników związku, który jest nazywany ogólnie według nomenklatury składu. Nomenklatura podstawnikowa jest opisana w Rozdziale IR-6, a nomenklatura addytywna w Rozdziałach IR-7, IR-8 i IR-9.

## IR-5.7 POZYCJE LITERATUROWE

1. Names for Inorganic Radicals, W.H.Koppenol, *Pure Appl. Chem.*, 72,437–446 (2000).
2. Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990,ed. G.J. Leigh, Blackwell ScientificPublications, Oxford, 1990.
3. Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001.
4. Nomenclature of Organic Chemistry, IUPACRecommendations ,eds. W.H.Powell and H. Favre,Royal Society of Chemistry, in preparation.

## **IR-6 Nazwy wodorków macierzystych i nomenklatura podstawnikowa**

### **Spis treści**

#### **IR-6.1 Wprowadzenie**

#### **IR-6.2 Nazwy wodorków macierzystych**

##### **IR-6.2.1 Jednojądrowe wodorki macierzyste ze standardowymi i niestandardowymi liczbami wiązań**

##### **IR-6.2.2 Homopolijądrowe wodorki macierzyste (inne niż wodorki boru i węgla)**

###### **IR-6.2.2.1 Homojądrowe acykliczne wodorki macierzyste, w których wszystkie atomy mają standardową liczbę wiązań**

###### **IR-6.2.2.2 Homojądrowe acykliczne wodorki macierzyste z pierwiastkami wykazującymi niestandardowe liczby wiązań**

###### **IR-6.2.2.3 Nienasycone homojądrowe acykliczne wodorki**

###### **IR-6.2.2.4 Homojądrowe monocykliczne wodorki macierzyste**

###### **IR-6.2.2.5 Homojądrowe policykliczne wodorki macierzyste**

##### **IR-6.2.3 Wodorki boru**

###### **IR-6.2.3.1 Nazwy stechiometryczne**

###### **IR-6.2.3.2 Nazwy z deskryptorami strukturalnymi**

###### **IR-6.2.3.3 Systematyczne numerowanie klastrów wielościennych**

###### **IR-6.2.3.4 Systematyczne nazewnictwo uwzględniające rozkład atomów wodoru**

##### **IR-6.2.4 Heterojądrowe wodorki macierzyste**

###### **IR-6.2.4.1 Heterojądrowe acykliczne wodorki macierzyste - zasady ogólne**

###### **IR-6.2.4.2 Wodorki składające się z łańcuchów naprzemiennych atomów szkieletowych**

###### **IR-6.2.4.3 Heterojądrowe monocykliczne wodorki macierzyste; nomenklatura Hantzsch-Widmana**

###### **IR-6.2.4.4 Podstawienie szkieletowe w wodorkach boru**

###### **IR-6.2.4.5 Heterojądrowe policykliczne wodorki macierzyste**

#### **IR-6.3 Nazewnictwo podstawnikowe pochodnych wodorków macierzystych**

##### **IR-6.3.1 Stosowanie przyrostków i przedrostków**

##### **IR-6.3.2 Podstawienie wodoru w wodorkach boru**

#### **IR-6.4 Nazwy jonów i rodników pochodzących od wodorków macierzystych**

##### **IR-6.4.1 Kationy powstałe z wodorków macierzystych przez przyłączenie jednego lub więcej hydronów**

##### **IR-6.4.2 Kationy powstałe z wodorków macierzystych przez utratę jednego lub więcej jonów wodorkowych**

##### **IR-6.4.3 Podstawione kationy**

##### **IR-6.4.4 Aniony powstałe z wodorków macierzystych przez utratę jednego lub więcej hydronów**

##### **IR-6.4.5 Aniony powstałe z wodorków macierzystych przez przyłączenie**

**jednego lub więcej jonów wodorkowych**

**IR-6.4.6 Podstawione aniony**

**IR-6.4.7 Rodniki i grupy podstawnikowe**

**IR-6.4.8 Podstawione rodniki i grupy podstawnikowe**

**IR-6.4.9 Centra anionowe i kationowe oraz rodniki w pojedynczej  
cząsteczce lub jonie**

**IR-6.5 Literatura**

## **IR-6.1 Wprowadzenie**

Nomenklatura podstawnikowa to system nazewnictwa oparty na wodorkach macierzystych, które zawierają określoną liczbę atomów wodoru przyłączonych do struktury szkieletowej. Aby utworzyć nazwy związków pochodnych, zastępuje się atomy wodoru innymi atomami lub grupami atomów (podstawnikami). Nazwy tych podstawników dodaje się do nazwy wodorku macierzystego jako przedrostki lub przyrostki, poprzedzając je w razie potrzeby lokantami wskazującymi pozycję podstawienia.

System ten stosuje się wyłącznie do pochodnych wodorków macierzystych wymienionych w Tabeli IR-6.1 (Rozdział IR-6.2.1) oraz pochodnych wodorków wielojądrowych zawierających tylko te pierwiastki (Rozdziały IR-6.2.2 do IR-6.2.4). Liczby wiązań atomów szkieletowych przyjmuje się zgodnie z Tabelą IR-6.1, gdzie podano standardowe liczby wiązań (np. 4 dla Si i 2 dla Se). Inne liczby wiązań wymagają oznaczenia odpowiednim deskryptorem (konwencja 'λ', szczegóły w Rozdziale IR-6.2.2.2 oraz Rozdziale P-14.1 pozycji literaturowej 1).

W nomenklaturze podstawnikowej związków nieorganicznych stosuje się te same zasady i konwencje, co w przypadku związków organicznych. Podstawową operacją jest zastąpienie atomów wodoru w strukturze macierzystej innymi atomami lub grupami atomów. Do nomenklatury podstawnikowej zalicza się również *podstawienie szkieletowe* (Rozdział IR-6.2.4.1) oraz *podstawienie funkcyjne* w macierzystych kwasach tlenowych (Rozdział IR-8.6). Niektóre modyfikacje nazw wodorków macierzystych, choć nie są typowymi operacjami podstawnikowymi (np. tworzenie kationów przez przyłączenie  $H^+$  lub anionów przez przyłączenie  $H^-$ ), również zalicza się do tej nomenklatury (szczegóły w Rozdziałach IR-6.4.1 i IR-6.4.5).

Większość związków opisanych w tym rozdziale może być nazywana zarówno według nomenklatury podstawnikowej, jak i addytywnej (Rozdział IR-7). Należy jednak podkreślić, że w przypadku omawianych tu wodorków macierzystych, ich nazwy addytywne nie mogą służyć jako nazwy macierzyste w nomenklaturze podstawnikowej.

Obojętne wodorki boru nazywane są boranami. Podstawowe zasady ich nazewnictwa przedstawiono w Rozdziale IR-6.2.3, natomiast bardziej zaawansowane aspekty zostaną omówione w przyszłej publikacji IUPAC.

## **IR-6.2 Nazwy wodorków macierzystych**

### **IR-6.2.1 Jednojądrowe wodorki macierzyste ze standardowymi i niestandardowymi liczbami wiązań**

Jednojądrowe wodorki pierwiastków grup 13-17 układu okresowego odgrywają kluczową rolę w nomenklaturze podstawnikowej. Są one wykorzystywane jako wodorki macierzyste, a ich nazwy przedstawiono w Tabeli IR-6.1.

Jeżeli liczba wiązań różni się od liczby standardowej, należy to zaznaczyć w nazwie wodorku za pomocą odpowiedniej liczby w indeksie górnym przy symbolu  $\lambda$  (lambda). Symbol ten oddziela się od nazwy podanej w Tabeli IR-6.1 łącznikiem.

Przykłady:

$\text{PH}_5$  -  $\lambda^5$ -fosfan

$\text{PH}$  -  $\lambda^1$ -fosfan

$\text{SH}_6$  -  $\lambda^6$ -sulfan

$\text{SnH}_2$  -  $\lambda^2$ -stannan

## IR-6.2.2 Homopolijądrowe wodorki macierzyste (inne niż wodorki boru i węgla)

### IR-6.2.2.1 Homojądrowe acykliczne wodorki macierzyste, w których wszystkie atomy mają standardową liczbę wiązań

Nazwy tworzy się poprzez dodanie do nazwy odpowiedniego wodorku monojądrowego z Tabeli IR-6.1 (zakończony na '-an') odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego ('di-', 'tri-', 'tetra-' itd.; patrz Tabela IV), który wskazuje ile atomów tego samego pierwiastka jest połączonych ze sobą w szereg.

Przykłady:

$\text{HOOH}$  - dioksydan lub nadtlenuk wodoru

$\text{H}_2\text{NNH}_2$  - diazan lub hydrazyna

$\text{H}_2\text{PPH}_2$  - difosfan

$\text{H}_3\text{SnSnH}_3$  - distanan

$\text{HSeSeSeH}$  - triselan

$\text{H}_3\text{SiSiH}_2\text{SiH}_2\text{SiH}_3$  - tetrasilan

Nazwa zwyczajowa 'nadtlenek wodoru' (patrz Rozdział IR-5) jest dopuszczalną alternatywą dla nazwy 'dioksydan' w przypadku samego  $\text{H}_2\text{O}_2$ , jednak nie może być stosowana jako nazwa wodorku macierzystego w nomenklaturze podstawnikowej.

Natomiast w przypadku  $\text{H}_2\text{NNH}_2$  i jego pochodnych organicznych stosujemy nazwę 'hydrazyna' jako podstawę do tworzenia nazw.

### IR-6.2.2.2 Homojądrowe acykliczne wodorki macierzyste z pierwiastkami o niestandardowej liczbie wiązań

W przypadku gdy w łańcuchu wodorku wszystkie atomy są takie same, ale jeden lub więcej ma liczbę wiązań inną niż standardowa (określona w Tabeli IR-6.1), nazwy tworzy się tak, jakby wszystkie atomy miały standardową liczbę wiązań. Przed taką nazwą umieszcza się lokanty (oznaczenia pozycji) dla każdego atomu o niestandardowej liczbie wiązań. Przy każdym lokancie dodaje się symbol  $\lambda^n$ , gdzie  $n$  oznacza odpowiednią liczbę wiązań.

Gdy zachodzi potrzeba wyboru między tym samym rodzajem atomu o różnych wartościowościach, niższy lokant przypisuje się atomowi o niestandardowej wartościowości. Jeśli dodatkowo zachodzi potrzeba wyboru między atomami o różnych niestandardowych wartościowościach, niższy lokant przypisuje się atomowi o wyższej liczbie wiązań - na przykład  $\lambda^6$  ma pierwszeństwo przed  $\lambda^4$ .

Tabela IR-6.1 Nazwy macierzyste jednojądrowych wodorków.

BH <sub>3</sub>	boran	CH <sub>4</sub>	metan <sup>a</sup>	NH <sub>3</sub>	azan <sup>b</sup>	H <sub>2</sub> O	oksydan <sup>b,c</sup>	HF	fluoran <sup>d</sup>
AlH <sub>3</sub>	aluman <sup>c</sup>	SiH <sub>4</sub>	silan	PH <sub>3</sub>	fosfan <sup>e</sup>	H <sub>2</sub> S	sulfan <sup>c,f</sup>	HCl	chloran <sup>d</sup>
GaH <sub>3</sub>	galan	GeH <sub>4</sub>	germanan	AsH <sub>3</sub>	arsan <sup>e</sup>	H <sub>2</sub> Se	selan <sup>c,f</sup>	HBr	broman <sup>d</sup>
InH <sub>3</sub>	indigan <sup>g</sup>	SnH <sub>4</sub>	stanan	SbH <sub>3</sub>	stiban <sup>e</sup>	H <sub>2</sub> Te	telan <sup>c,f</sup>	HI	jodan <sup>d</sup>
TlH <sub>3</sub>	talán	PbH <sub>4</sub>	plumban	BiH <sub>3</sub>	bismutan <sup>c</sup>	H <sub>2</sub> Po	polan <sup>c,f</sup>	HAt	astatan <sup>d</sup>

a) Systematycznym odpowiednikiem jest "karban". Ze względu na powszechne stosowanie nazwy "metan" dla CH<sub>4</sub>, nazwa "karban" nie jest zalecana.

b) Nazwy "azan" i "oksydan" są przeznaczone wyłącznie do tworzenia nazw pochodnych odpowiednio amoniaku i wody według nomenklatury podstawnikowej oraz stanowią podstawę do nazywania układów polijądrowych (np. triazan, dioksydan). Przykłady takiego zastosowania można znaleźć w Rozdziale IR-6.4 i Tabeli IX. W Rozdziale P-62 pozycji literaturowej 1 wiele pochodnych organicznych amoniaku nazywa się na podstawie przyrostków grup podstawnikowych "amina" i "imina".

c) Nazwy aluminan, bisman, oksan, tian, selenan, telurán i polonan nie mogą być używane, ponieważ są to nazwy nasyconych sześciocząłonowych heterocyklicznych związków w systemie Hantzsch-Widmana (patrz Rozdział IR-6.2.4.3). Nazwa 'alan' była używana dla AlH<sub>3</sub>, jednak należy jej unikać, ponieważ systematycznie utworzona nazwa grupy podstawnikowej -AlH<sub>2</sub> brzmiałaby 'alanyl', która jest już powszechnie stosowaną nazwą grupy acylowej pochodzącej od aminokwasu alaniny.

d) Nazwy "fluoran", "chloran", "broman", "jodan" i "astatan" zostały tu uwzględnione, ponieważ stanowią podstawę do tworzenia nazw podstawnikowych jonów, rodników i grup podstawnikowych (przykłady w Rozdziale IR-6.4.7 i Tabeli IX). Niepodstawione wodorki można również nazywać "fluorowodór", "bromowodór" itd. (nomenklatura składu, Rozdział IR-5). Jednak tych nazw składu nie można używać jako nazw macierzystych.

e) W całej książce stosuje się systematyczne nazwy "fosfan", "arsan" i "stiban". Nazwy "fosfina", "arsina" i "stibina" nie są już akceptowane.

f) Niepodstawiony sulfan można również nazywać "siarkowodór" lub lepiej "siarczek diwodoru" (nomenklatura składu, Rozdział IR-5). Jednak nazwa składu nie może być używana jako nazwa macierzysta. Podobne uwagi dotyczą selanu, tellanu i polanu.

g) Analogiczna nazwa systematyczna dla InH<sub>3</sub> brzmiałaby "indan", która jest jednak ugruntowaną nazwą węglowodoru 2,3-dihydro-1*H*-indenu. Nazwa "indian" prowadziłaby do nieporozumień przy nazywaniu pochodnych nienasyconych, np. "triindien" mógłby oznaczać zarówno związek z dwoma wiązaniami podwójnymi (dien), jak i mono-nienasyconą pochodną triindianu. Nazwa macierzysta "indigan" pochodzi od etymologicznego źródła "indygo" (od barwy płomienia indu).



Przykłady:

1.  $\overset{1}{\text{H}}\overset{2}{\text{S}}\overset{3}{\text{S}}\overset{4}{\text{S}}\text{H}$   
 $1\lambda^6, 3\lambda^6$ -tetrasulfan (nie:  $2\lambda^6, 4\lambda^6$ )
2.  $\overset{1}{\text{H}}\overset{2}{\text{S}}\overset{3}{\text{S}}\overset{4}{\text{S}}\overset{5}{\text{S}}\text{H}_2\text{SH}$   
 $2\lambda^6, 3\lambda^6, 4\lambda^4$ -pentasulfan (nie:  $2\lambda^4, 3\lambda^6, 4\lambda^6$ )
3.  $\text{H}_4\overset{1}{\text{P}}\overset{2}{\text{P}}\overset{3}{\text{P}}\overset{4}{\text{P}}\text{H}_4$   
 $1\lambda^5, 2\lambda^5, 3\lambda^5, 4\lambda^5$ -tetrafosfan
4.  $\text{H}\overset{1}{\text{Pb}}\overset{2}{\text{Pb}}\overset{3}{\text{Pb}}\text{H}$   
 $1\lambda^2, 2\lambda^2, 3\lambda^2$ -triplumban

#### IR-6.2.2.3 *Nienasycone homojądrowe wodorki acykliczne*

Nazwy łańcuchów zawierających wiązania nienasycone tworzy się według metod stosowanych dla alkenów i alkinów (patrz Sekcja P-31.1 pozycji literaturowej nr 1). Nazwę odpowiedniego nasyconego wodorku łańcuchowego modyfikuje się poprzez zamianę końcówki 'an' na 'en' w przypadku wiązania podwójnego oraz 'yn' w przypadku wiązania potrójnego. Gdy występuje jedno wiązanie podwójne i jedno potrójne, końcówka przybiera formę 'en...yn'. Przy dwóch wiązaniach podwójnych używa się końcówki 'dien', i tak dalej. W każdym przypadku pozycję (lub pozycje) wiązań nienasyconych wskazuje się za pomocą lokantów liczbowych umieszczonych bezpośrednio przed przyrostkiem. Lokanty wybiera się tak, aby były jak najniższe.

Przykłady:

1.  $\text{HN}=\text{NH}$  - diazen
2.  $\text{HSb}=\text{SbH}$  - distiben
3.  $\text{H}_2\text{NN}=\text{NN}-\text{NH}_2$  - pentaaz-2-en (nie: pentaaz-3-en)

Nienasycone wodorki acykliczne nie są klasyfikowane jako wodorki macierzyste. Ze względu na hierarchiczne reguły nomenklatury podstawnikowej, numerowanie wiązań podwójnych i potrójnych może nie być ustalone do momentu ponumerowania różnych grup i modyfikacji (przykład w Sekcji IR-6.4.9).

#### IR-6.2.2.4 *Homojądrowe monocykliczne wodorki macierzyste*

Istnieją trzy główne sposoby tworzenia nazw macierzystych dla homojądrowych wodorków monocyklicznych:

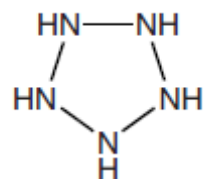
- (i) poprzez użycie nazewnictwa Hantzsch-Widmana (H-W) (patrz Sekcja IR-6.2.4.3 i Sekcja P-22.2 pozycji literaturowej nr 1);
- (ii) poprzez zastosowanie odpowiedniego przedrostka zamiennego (określenie 'a') z Tabeli X wraz z właściwym przedrostkiem zwielokrotniającym, aby wskazać zastąpienie atomów węgla w nazwie odpowiedniego związku karbocyklicznego (patrz Sekcja P-22.2 pozycji literaturowej nr 1);

(iii) poprzez dodanie przedrostka 'cyklo' do nazwy odpowiedniego nierozgałęzionego, niepodstawionego łańcucha (patrz Sekcje IR-6.2.2.1 do IR-6.2.2.3 oraz Sekcja P-22.2 pozycji literaturowej nr 1).

Każda z tych metod jest wykorzystana w przykładach podanych poniżej. Przy tworzeniu nazw pochodnych organicznych niewęglowych homojądrowych monocyklicznych wodorków macierzystych, preferowane jest nazewnictwo Hantzsch-Widmana dla pierścieni zawierających od 3 do 10 członów. Dla większych pierścieni stosuje się nazwy utworzone według drugiej metody. Bardziej szczegółowe zasady dotyczące nazewnictwa wodorków macierzystych z dużymi pierścieniami można znaleźć w Sekcji P-22.2 pozycji literaturowej nr 1.

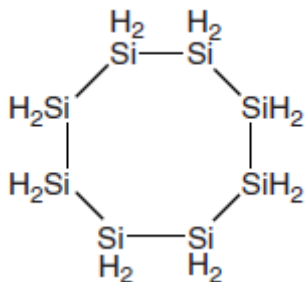
Przykłady:

1.



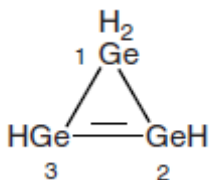
- (i) nazwa H-W: pentaazolidyna
- (ii) pentaazacyklopentan
- (iii) cyklopentaazan

2.



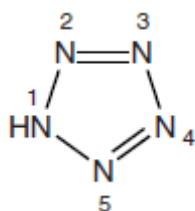
- (i) nazwa H-W: oktasiloksan
- (ii) oktasilacyklooktan
- (iii) cyklooktasilan

3.

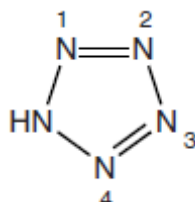


- (i) nazwa H-W: 1H-trigermirena
- (ii) trigermacyklopropen
- (iii) cyklotrighermen

4.



(i) nazwa H-W: 1H-pentazol



(i) pentaazacyklopenta-1,3-dien

(ii) cyklopentaaza-1,3-dien

Należy zauważyć, że w ostatnim przedstawionym powyżej przykładzie numeracja dla nazwy H-W różni się od numeracji w pozostałych dwóch metodach; priorytety w systemie H-W zależą od położenia atomu H, natomiast w metodach (ii) i (iii) zależą od położenia wiązań podwójnych.

#### IR-6.2.2.5 Homonuklearne policykliczne wodorki macierzyste

Nazwy macierzyste homojądrowych związków policyklicznych można tworzyć trzema metodami:

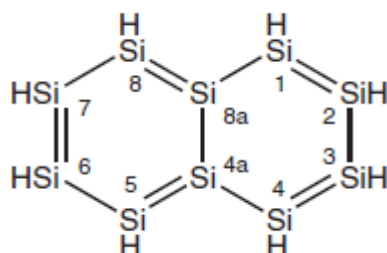
(i) poprzez określenie skondensowania odpowiednich układów monocyklicznych (patrz Sekcja P-25.3 pozycji literaturowej nr 1), z których każdy jest nazwany według systemu Hantzsch-Widmana (patrz Sekcja IR-6.2.4.3);

(ii) poprzez zastąpienie atomów węgla w odpowiednim związku karbocyklicznym innymi atomami - w tym celu używa się przedrostka zamiennego (określenie 'a') z Tabeli X, który określa rodzaj atomu zastępującego węgiel oraz odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego, który wskazuje ile atomów węgla zostało zastąpionych;

(iii) poprzez połączenie dwóch elementów nazwy: użycie notacji von Baeyera, która opisuje sposób połączenia pierścieni i ich wielkość (jest to system numeryczny opisujący strukturę przestrzenną układu pierścieniowego) a następnie dodanie nazwy odpowiedniego wodorku liniowego (utworzoną według zasad z Sekcji IR-6.2.2.1).

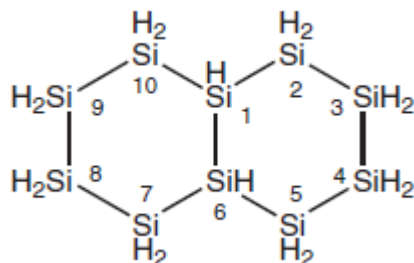
Przykłady:

1.



- (i) heksasilinoheksasilina
- (ii) dekasilanaftalen

2.



- (ii) i (iii) dekasilabicyklo[4.4.0]dekan
- (iii) bicyklo[4.4.0]dekasilan

### IR-6.2.3 Wodorki boru

#### IR-6.2.3.1 Nazwy stechiometryczne

Obojętne wodorki boru nazywa się boranami, przy czym najprostsza struktura, czyli  $BH_3$ , nosi nazwę 'boran'. Do wskazania liczby atomów boru w cząsteczce używa się przedrostków zwielokrotniających. W przeciwieństwie do nomenklatury węglowodorów, w przypadku boranów konieczne jest podanie dokładnej liczby atomów wodoru, ponieważ nie można jej wywnioskować na podstawie zwykłych reguł wiązań. Liczbę atomów wodoru zapisuje się jako cyfrę arabską w nawiasach, którą umieszcza się bezpośrednio po nazwie. W ten sposób utworzone nazwy informują nas tylko o składzie związku.

Przykłady:

1.  $B_2H_6$       diboran(6)
2.  $B_{20}H_{16}$     ikozaboran(16)

#### IR-6.2.3.2 Nazwy z deskryptorami strukturalnymi

Więcej informacji strukturalnych uzyskuje się poprzez uzupełnienie nazwy stechiometrycznej o deskryptor strukturalny. Deskryptor opiera się na zależnościach dotyczących liczby elektronów<sup>2</sup> i jest przedstawiony w Tabeli IR-6.2.

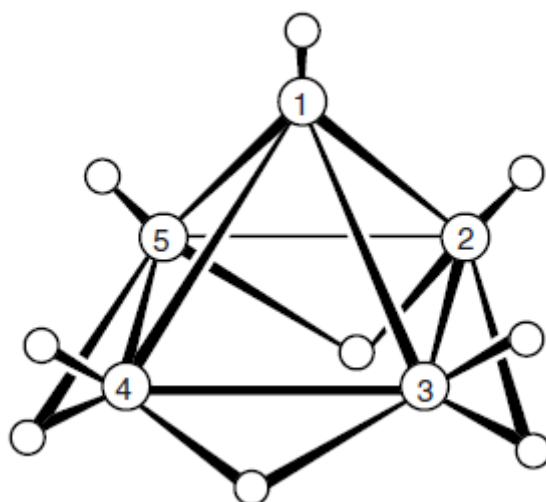
Tabela IR-6.2 Klasyfikacja strukturalna wodorków wieloborowych - zależności stechiometryczne i elektronowe<sup>a</sup>. "Pary elektronów szkieletowych" (ang. *skeletal electron pairs*) odnoszą się do liczby par elektronów, które tworzą wiązania w szkielecie cząsteczki boranu.

Deskryptor	Pary elektronów szkieletowych	Wodorek macierzysty	Opis struktury
<i>kloso</i>	$n+1$	$B_nH_{n+2}$	Zamknięta struktura wielościenne zawierająca tylko trójkątne ściany
<i>nido</i>	$n+2$	$B_nH_{n+4}$	Struktura wielościenne typu "gniazdo" bez pełnego zamknięcia; $n$ wierzchołków macierzystego wielościanu <i>kloso</i> o $(n+1)$ atomach jest zajętych
<i>arachno</i>	$n+3$	$B_nH_{n+6}$	Struktura wielościenne typu "pajęczyna" bez pełnego zamknięcia; $n$ wierzchołków macierzystego wielościanu <i>kloso</i> o $(n+2)$ atomach jest zajętych
<i>hifo</i>	$n+4$	$B_nH_{n+8}$	Struktura wielościenne typu "sieć" bez pełnego zamknięcia; $n$ wierzchołków macierzystego wielościanu <i>kloso</i> o $(n+3)$ atomach jest zajętych
<i>klado</i>	$n+5$	$B_nH_{n+10}$	Struktura typu "gałąź" bez pełnego zamknięcia wielościanu; $n$ wierzchołków macierzystego wielościanu <i>kloso</i> o $(n+4)$ atomach jest zajętych

<sup>a</sup> Zależności strukturalne są często przedstawiane za pomocą diagramu Rudolpha<sup>3</sup>

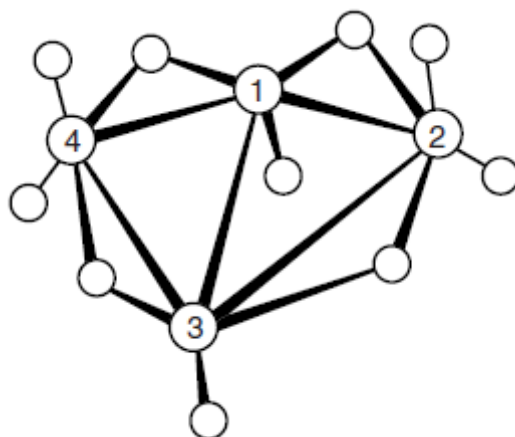
Przykłady:

1.



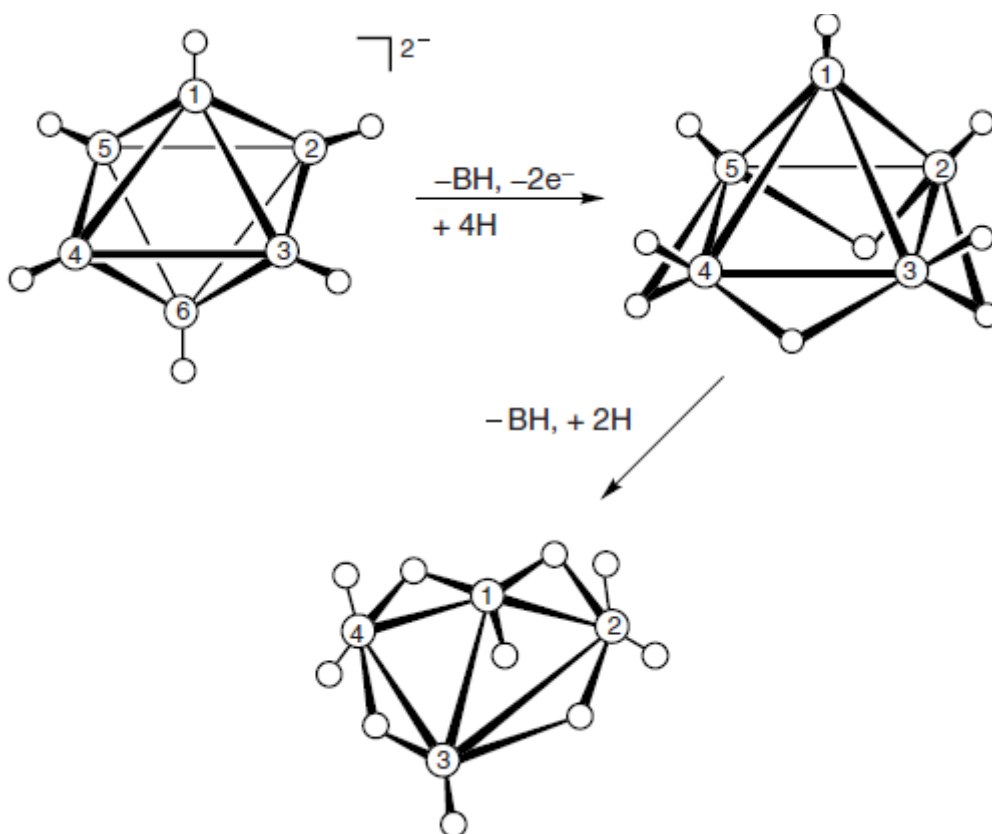
*nido*-pentaboran(9),  $B_5H_9$

2.



*arachno*-tetraboran(10),  $B_4H_{10}$

Dwie struktury w powyższych przykładach można rozpatrywać jako powiązane ze strukturą *kloso*- $B_6H_6^{2-}$  w następujący sposób:

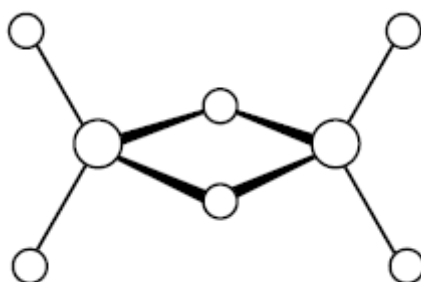


Struktury te otrzymuje się formalnie poprzez usunięcie jednej (przykład 1) lub dwóch (przykład 2) grup BH i dodanie odpowiedniej liczby atomów wodoru.

Należy zauważyć, że przedrostki *nido*, *arachno* itd. nie są używane dla najprostszych boranów, gdyż ich formalne wyprowadzenie ze struktur macierzystych typu *kloso* poprzez kolejne odejmowania nie odzwierciedlałoby właściwie ich struktury.

Dla związków łańcuchowych stosuje się przedrostek '*katena*', który jednoznacznie określa ich strukturę.

Przykład 3:



diboran(6), B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>

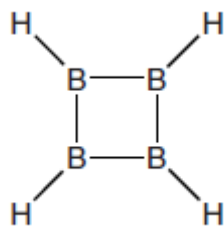
4. H<sub>2</sub>BBHBH<sub>2</sub> *katena-triboran(5)*

5. HB=BBH<sub>2</sub> *katena-triboren(3)*

Dla układów cyklicznych można stosować przedrostek 'cyklo' w połączeniu z nazwą odpowiedniego związku łańcuchowego lub system nazewnictwa Hantzsch-Widmana (H-W) (patrz Sekcja IR-6.2.4.3).

Przykład:

6.



cyklotetaboran  
nazwa H-W: tetraboretan

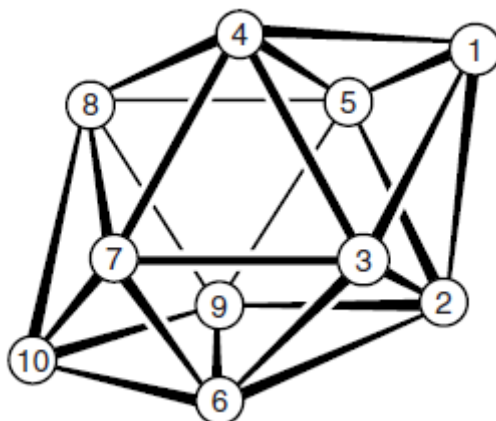
#### IR-6.2.3.3 Numeracja klastrów o strukturze wielościennej

Aby móc jednoznacznie nazywać pochodne podstawione, każdy klasterek wymaga właściwego ponumerowania atomów boru w jego szkielecie. W strukturach typu *klosa* atomy boru rozmieszczone są w kolejnych płaszczyznach, które są prostopadłe do osi o najwyższej symetrii. Jeśli występują dwie takie osie, wybieramy tę, która przechodzi przez większą liczbę płaszczyzn prostopadłych.

Numerację rozpoczynamy od atomu boru położonego najbliżej, gdy patrzymy wzdłuż wybranej osi. Następnie numerujemy pozostałe atomy w pierwszej płaszczyźnie, poruszając się zgodnie lub przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Kolejną płaszczyznę numerujemy w tym samym kierunku, zaczynając od atomu boru, który jest najbliżej najniżej oznaczonego atomu z poprzedniej płaszczyzny.

Przykład:

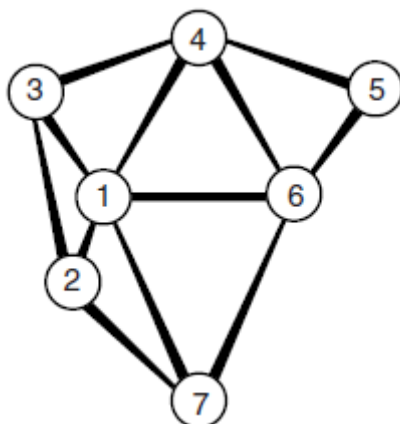
1.



*kloso*-B<sub>10</sub>H<sub>10</sub><sup>2-</sup> (pominięto atomy H)

Numerację w klastrach typu *nido* wywodzi się z numeracji odpowiedniego klastra typu *kloso*. W przypadku klastrów typu *arachno* i klastrów o bardziej otwartej strukturze, otwartą stronę kieruje się w stronę obserwatora, a atomy boru traktuje się jak rzutowane na tylną płaszczyznę. Następnie numeruje się je kolejno w strefach, zaczynając od centralnego atomu boru o największej liczbie połączeń i poruszając się zgodnie lub przeciwnie do ruchu wskazówek zegara, aż do zakończenia numeracji strefy wewnętrznej. Kolejną strefę numeruje się w tym samym kierunku, rozpoczynając od pozycji "godziny dwunastej", i tak dalej aż do zakończenia numeracji strefy zewnętrznej. Taki sposób numeracji sprawia, że numeracja struktury macierzystej typu *kloso* prawdopodobnie nie będzie odpowiadać numeracji w odpowiednim układzie typu *arachno*.

Przykład:  
2.



*arachno*-B<sub>7</sub>H<sub>13</sub> (pominięto atomy H)

W przypadku gdy istnieje możliwość wyboru, cząsteczkę orientuje się tak, aby pozycję "godziny dwunastej" ustalić według następujących kryteriów stosowanych kolejno:

- (i) pozycja "godziny dwunastej" leży w płaszczyźnie symetrii zawierającej jak najmniejszą liczbę atomów boru;
- (ii) pozycja "godziny dwunastej" znajduje się w tej części płaszczyzny symetrii, która zawiera największą liczbę atomów szkieletowych;



(iii) pozycja "godziny dwunastej" jest położona naprzeciwko większej liczby atomów mostkowych.

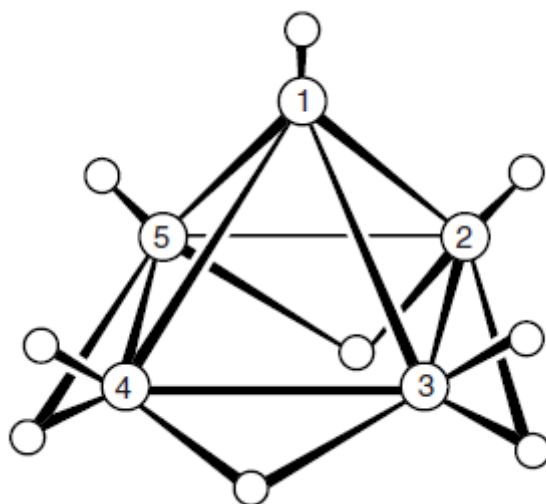
Zastosowanie powyższych kryteriów może nie doprowadzić do jednoznacznego rozstrzygnięcia, a w przypadku braku płaszczyzny symetrii kryteria te nie mają zastosowania. W takich przypadkach stosuje się ogólne zasady numeracji organicznej, na przykład wybiera się taki schemat numeracji, który przypisuje podstawionym atomom najniższe lokanty.

#### IR-6.2.3.4 Systematyczne nazewnictwo uwzględniające rozmieszczenie atomów wodoru

W boranach o strukturze otwartej można założyć, że każdy atom boru ma przyłączony co najmniej jeden terminalny atom wodoru. Konieczne jest jednak określenie położenia mostkowych atomów wodoru przy użyciu symbolu  $\mu$ , poprzedzonego lokantami pozycji szkieletowych połączonych mostkiem, zapisanymi w porządku rosnącym. W nazwie dla mostkowych atomów wodoru stosuje się oznaczenie  $H$ .

Przykład:

1.



2,3:2,5:3,4:4,5-tetra- $\mu H$ -nido-pentaboran(9)

Ten sposób oznaczania mostkowych atomów wodoru został zaadaptowany z metody "wskazanego wodoru" stosowanej w nomenklaturze organicznej (patrz Sekcja P-14.6 pozycji literaturowej nr 1). Zgodnie z metodą "wskazanego wodoru" nazwa związku brzmiałaby: (2,3- $\mu H$ ),(2,5- $\mu H$ ),(3,4- $\mu H$ ),(4,5- $\mu H$ )-nido-pentaboran(9).

#### IR-6.2.4 Heterojądrowe wodorki macierzyste

##### IR-6.2.4.1 Ogólne zasady nazewnictwa heterojądrowych acyklicznych wodorków macierzystych

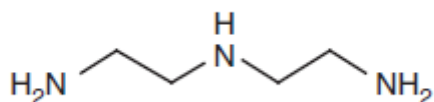
Nomenklaturę zamienną szkieletu (nomenklaturę 'a') można stosować, gdy co najmniej cztery atomy węgla w nierozgałęzionym łańcuchu węglowodoru macierzystego zostają zastąpione heteroatomami, takimi samymi lub różnymi, a skrajne atomy węgla albo pozostają niezmienione, albo są zastąpione przez P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In lub Tl (patrz Sekcje P-15.4 i P-21.2 pozycji literaturowej nr 1).

W tej metodzie najpierw tworzy się nazwę łańcucha tak, jakby składał się wyłącznie z atomów węgla. Następnie wszystkie heteroatomy w łańcuchu oznacza się odpowiednimi przedrostkami zamiennymi (określenie 'a') z Tabeli X, wymienianymi w kolejności podanej w Tabeli VI. Przed każdym przedrostkiem umieszcza się odpowiedni lokant. Lokanty przypisuje się numerując łańcuch od tego końca, który daje niższe lokanty dla całego zestawu heteroatomów. Jeśli lokanty są równe, numeruje się od końca dającego niższy lokant lub zestaw lokantów dla pierwszego wymienionego przedrostka zamiennego. Jeśli nadal istnieje możliwość wyboru, niższe lokanty przypisuje się miejscom nienasyceń.

Nazwy macierzyste tworzone w ten sposób nadaje się tylko łańcuchom zawierającym co najmniej cztery heteroatomy (ściślej mówiąc, cztery lub więcej jednostek hetero). Jednostka hetero to sekwencja heteroatomów, która sama w sobie stanowi szkielet wodorku macierzystego, np. Se, SS i SiOSi (patrz Sekcja IR-6.2.4.2), ale nie OSiO. Przy liczeniu heteroatomów nie uwzględnia się tych, które należą do głównej grupy charakterystycznej (jeśli taka występuje) (patrz Sekcja IR-6.3.1). Łańcuchy heterojądrowe zawierające mniej jednostek hetero oraz łańcuchy heterojądrowe niezakończone żadnym z wymienionych wyżej atomów nazywa się jako pochodne homojądrowych wodorków macierzystych i nie używa się ich jako związków macierzystych.

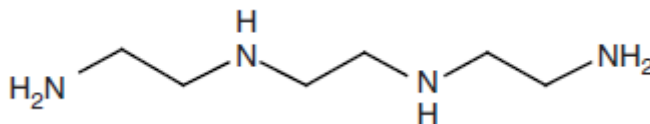
Przykłady:

1.



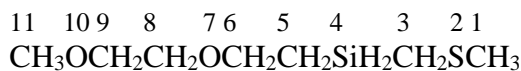
*N*-(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina

2.



*N,N'*-bis(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina

3.



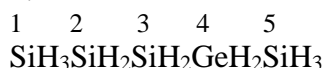
7,10-dioksa-2-tia-4-silaundekana

(Nazwa macierzysta. Uwaga: nazwa nie brzmi 2,5-dioksa-10-tia-8-silaundekana, ponieważ zestaw lokantów 2,4,7,10 ma pierwszeństwo przed zestawem lokantów 2,5,8,10.)

Jednoznaczne nazwy macierzyste dla łańcuchów heterojądrowych niezawierających węgla można utworzyć na podstawie węglowodoru macierzystego lub homojądrowego łańcucha niezawierającego węgla (por. Sekcja IR-6.2.2.1). Alternatywnie, łańcuchy heterojądrowe można nazywać metodą addytywną opisaną w Sekcji IR-7.4. Jednak takich nazw nie można stosować jako nazw macierzystych w nomenklaturze podstawnikowej.

Przykład:

4.



1,2,3,5-tetrasil-4-germpentan (nie: 1,3,4,5-tetrasil-2-germapentan), lub  
2-germapentasilan (uwaga: oparte na innej numeracji), lub  
1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,5-dodekawodorido-4-germy-1,2,3,5-tetrasily-katena

#### IR-6.2.4.2 *Wodorki składające się z łańcuchów naprzemiennych atomów szkieletowych*

Wodorki łańcuchowe ze szkieletem zbudowanym z naprzemiennie ułożonych atomów dwóch pierwiastków A i E, z których żaden nie jest węglem, czyli sekwencji  $(AE)_nA$ , gdzie pierwiastek A występuje później w sekwencji z Tabeli VI, można nazwać poprzez kolejne wymienienie następujących części nazwy:

- (i) przedrostek zwielokrotniający (Tabela IV) określający liczbę atomów pierwiastka A, bez pomijania końcowej samogłoski tego przedrostka;
- (ii) przedrostki zamienne zakończone na 'a' (Tabela X) oznaczające pierwiastki A i E w tej kolejności (z pominięciem końcowego 'a' przedrostka zamiennego przed innym 'a' lub 'o');
- (iii) końcówka 'an'.

Przykłady:

1. $\text{SnH}_3\text{OSnH}_2\text{OSnH}_2\text{OSnH}_3$	tetrastanoksan
2. $\text{SiH}_3\text{SSiH}_2\text{SSiH}_2\text{SSiH}_3$	tetrasilatian
3. $\text{PH}_2\text{NHPHNHPH}_2$	trifosfazan
4. $\text{SiH}_3\text{NHSiH}_3$	disilazan
5. $\text{PH}_2\text{N=PNHPHNHPH}_2$	tetrafosfaz-2-en

Pierwsze cztery struktury stanowią wodorki macierzyste, w przeciwieństwie do związku nienasyconego (patrz uwagi w Sekcji IR-6.2.2.3).

#### IR-6.2.4.3 *Heterojądrowe monocykliczne wodorki macierzyste; nazewnictwo Hantzsch-Widmana*

Dla heterojądrowych monocyklicznych wodorków macierzystych istnieją dwa ogólne systemy nazewnictwa, a w niektórych przypadkach również trzecia możliwość.

(i) W rozszerzonym systemie Hantzsch-Widmana (H-W) nazwa związku zawiera kilka kluczowych elementów, które przekazują ważne informacje strukturalne. Nazwa wskazuje wielkość pierścienia, informując o liczbie atomów tworzących pierścień, oraz określa obecność heteroatomów, czyli atomów innych niż węgiel. Ponadto, system ten precyzuje stopień uwodornienia pierścienia. Może on być między innymi minimalny (maksymalnie nienasycony), co oznacza największą możliwą liczbę wiązań podwójnych, które nie występują jeden obok drugiego, lub maksymalny (nasycony), gdzie występują wyłącznie wiązania pojedyncze. Wszystkie te informacje są przekazywane za pomocą specjalnych przedrostków i końcówek, które zostały zestawione w Tabeli IR-6.3. W przypadku związków o pośrednim stopniu uwodornienia, czyli takich, które nie są ani całkowicie nasycone, ani nie mają maksymalnej liczby wiązań podwójnych, stosuje się przedrostek 'hydro' wraz z odpowiednim przedrostkiem liczbowym. Należy jednak pamiętać, że takie związki o pośrednim stopniu uwodornienia nie są uznawane za związki macierzyste.

Kolejność wymieniania heteroatomów jest zgodna z Tabelą VI, czyli  $F \rightarrow Cl \rightarrow Br \rightarrow I \rightarrow O \dots$  itd., gdzie '→' oznacza 'jest wymieniane przed'. Lokanty przypisuje się heteroatomom tak, aby:

- najpierw lokant '1' był przypisany atomowi wymienianemu jako pierwszy

- następnie cały zestaw lokantów był możliwie najniższy przy zachowaniu kolejnego numerowania pozycji w pierścieniu (uporządkowanie zestawów lokantów alfanumerycznie).

Heteroatomy oznacza się przedrostkami zamiennymi (określenie 'a') podanymi w Tabeli X wraz z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi. (Wyjątkowo, określenie 'a' dla glinu i indu w systemie Hantzsch-Widmana to odpowiednio 'aluma' i 'indiga'.) W przypadku pierścieni sześcioczłonowych, heteroatom pierścieniowy wymieniany jako ostatni decyduje o wyborze jednej z alternatywnych końcówek z Tabeli IR-6.3.

Tautomery można rozróżnić używając wskazanego wodoru do określenia położenia atomu(ów) wodoru, który może być umieszczony na więcej niż jeden sposób [a tym samym pośrednio położenie wiązania(ń) podwójnego], jak w przykładzie 2 znajdującym się poniżej.

Tabela IR-6.3 Końcówki w systemie Hantzsch-Widmana

Liczba atomów w pierścieniu	Maksymalne nienasycenie	Nasycony
3	iren ('iryndyna' dla pierścieni z N jako jedynym heteroatomem)	iran ('iryndyna' dla pierścieni zawierających N)
4	et	etan ('etyndyna' dla pierścieni zawierających N)
5	ol	olan ('olidyna' dla pierścieni zawierających N)
6(A) <sup>b</sup>	in	inan
6(B) <sup>b</sup>	inin	inan
6(C) <sup>b</sup>	epin	epan
7	ocyn	okan
8	onin	onan
9	ecyn	ekan
10	ecyn	ekan

<sup>a</sup> Maksymalna liczba wiązań podwójnych które nie występują jeden obok drugiego

<sup>b</sup> 6(A) stosuje się, gdy ostatni wymieniony heteroatom to O, S, Se, Te, Po lub Bi;

6(B) stosuje się, gdy ostatni wymieniony heteroatom to N, Si, Ge, Sn lub Pb;

6(C) stosuje się, gdy ostatni wymieniony heteroatom to F, Cl, Br, I, P, As, Sb, B, Al, Ga, In lub Tl.

(ii) Alternatywnie, nazwę można utworzyć bazując na nazwie odpowiedniego karbocyklu (pierścienia węglowego), gdzie heteroatomy oznacza się przedrostkami zamiennymi ('terminy a') z Tabeli X wraz z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi. Kolejność wymieniania jest zgodna z Tabelą VI.

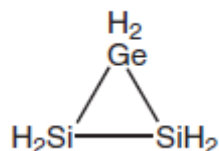
(iii) W szczególnym przypadku nasyconych pierścieni zawierających naprzemiennie dwa rodzaje atomów szkieletowych (jak w Przykładach 3-6), nazwę tworzy się używając przedrostka 'cyklo', po którym następują przedrostki zamienne (z Tabeli X) wymieniane w odwrotnej kolejności niż odpowiadające im pierwiastki w Tabeli VI. Nazwa kończy się na 'an'.

Dla pierścieni zawierających do 10 atomów preferuje się nazewnictwo według systemu Hantzsch-Widmana. W przypadku większych pierścieni, niezależnie od tego czy są nasycone czy zawierają maksymalną liczbę wiązań podwójnych (typ mancude), stosuje się metodę (ii).

Szczegółowe zasady dotyczące nazewnictwa dużych układów pierścieniowych znajdują się w Sekcji P-22.2 pozycji literaturowej nr 1.

Przykłady:

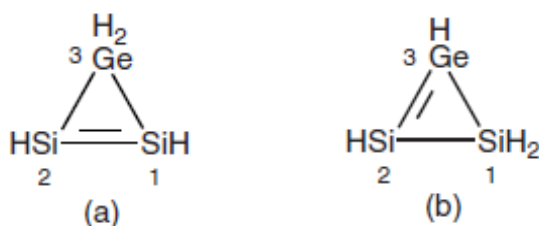
1.



(i) Nazwa H-W: disilagermiren

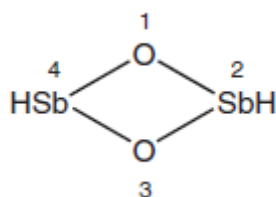
(ii) disilagermacyklopropan

2.



Nazwy H-W: 3*H*-1,2,3-disilagermiren (a) i 1*H*-1,2,3-disilagermiren (b)

3.

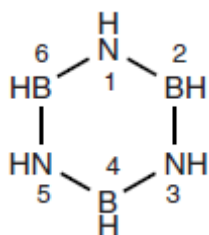


(i) Nazwa H-W: 1,3,2,4-dioksadistibetan

(ii) 1,3-dioksa-2,4-distibacyklobutan

(iii) cykloadistiboksan

4.

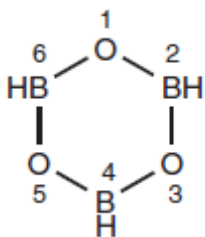


(i) Nazwa H-W: 1,3,5,2,4,6-triazatriborinan

(ii) 1,3,5-triaza-2,4,6-triboracykloheksan

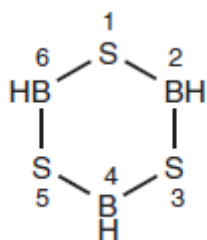
(iii) cyklotriborazan

5.



- (i) Nazwa H-W: 1,3,5,2,4,6-trioksatriborinan
- (ii) 1,3,5-trioksa-2,4,6-triboracykloheksan
- (iii) cyklotriboroksan

6.

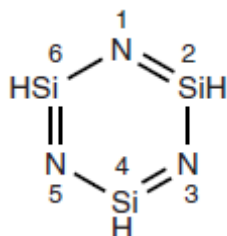


- (i) Nazwa H-W: 1,3,5,2,4,6-tritiatriborinan
- (ii) 1,3,5-tritia-2,4,6-triboracykloheksan
- (iii) cyklotriboratianan

W systemie Hantzsch-Widmana zrezygnowano z używania nazw borazol, boroksol i bortiol dla związków z Przykładów 4, 5 i 6, ponieważ błędnie sugerowały obecność pierścieni pięcioczłonowych. Nie stosuje się również nazw borazyn(a), boroksyn i bortiin, które nieprawidłowo wskazywałyby na obecność pierścieni sześcioczłonowych nienasyconych z pojedynczym atomem boru i jednym innym heteroatomem, a dodatkowo mają niewłaściwą kolejność pierwiastków w nazwie.

Przykład:

7.

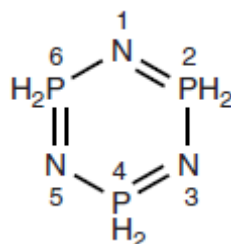


- (i) Nazwa H-W: 1,3,5,2,4,6-triazatrisilin
- (ii) 1,3,5-triaza-2,4,6-trisilacykloheksa-1,3,5-trien

Jeśli atomy w pierścieniu tworzą inną liczbę wiązań niż ich standardowa wartościowość (patrz Sekcja IR-6.2.1), faktyczną liczbę wiązań oznacza się symbolem  $\lambda$  (lambda) z odpowiednim indeksem górnym, który umieszcza się zaraz po lokancie danego atomu.

Przykład:

8.



- (i) Nazwa H-W: 1,3,5,2 $\lambda^5$ ,4 $\lambda^5$ ,6 $\lambda^5$ -triazatrifosfinin
- (ii) 1,3,5-triaza-2 $\lambda^5$ ,4 $\lambda^5$ ,6 $\lambda^5$ -trifosfacykloheksa-1,3,5-trien

#### IR-6.2.4.4 Podstawienie szkieletowe w wodorkach boru

W pochodnych wodorków boru możliwe jest zachowanie podstawowej struktury szkieletowej, w której jeden lub więcej atomów boru zostaje zastąpionych innymi atomami. Nazwy takich związków tworzy się poprzez adaptację nomenklatury zamiennej, uzyskując karborany, azaborany, fosforborany, tiaborany itd.

W heteroboranych liczba najbliższych sąsiadów heteroatomu może być różna i wynosić 5, 6, 7 itd. Dlatego w adaptacji nomenklatury zamiennej do związków poliboranych, zastąpienie atomu boru innym atomem zaznacza się w nazwie wraz z liczbą atomów wodoru w powstałej strukturze wielościennej.

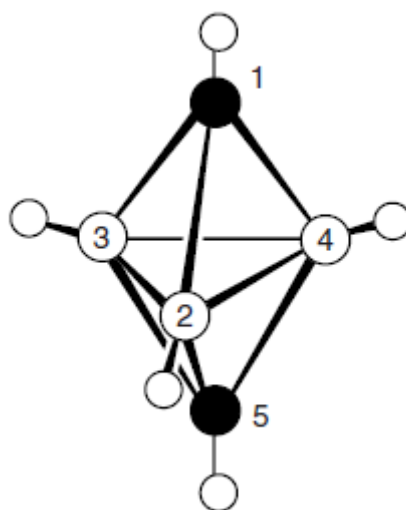
Przedrostki *kloso*, *nido*, *arachno* itd. pozostają takie same jak opisano dla wodorków boru (Sekcja IR-6.2.3.2). Pozycje heteroatomów zastępujących atomy boru w szkielecie wielościennej oznacza się lokantami, które są najniższymi możliwymi liczbami zgodnymi z numeracją macierzystego poliboranu. Jeśli istnieje możliwość wyboru przy przypisywaniu lokantów w danym zestawie, niższe numery przypisuje się pierwiastkowi, który występuje wcześniej według Tabeli VI.

Liczbę atomów wodoru w danym związku (a nie w macierzystym związku zawierającym tylko atomy boru w szkielecie) dodaje się jako cyfrę arabską w nawiasach na końcu nazwy. Liczba ta pozostaje również po podstawieniu wodoru.

Przykłady:

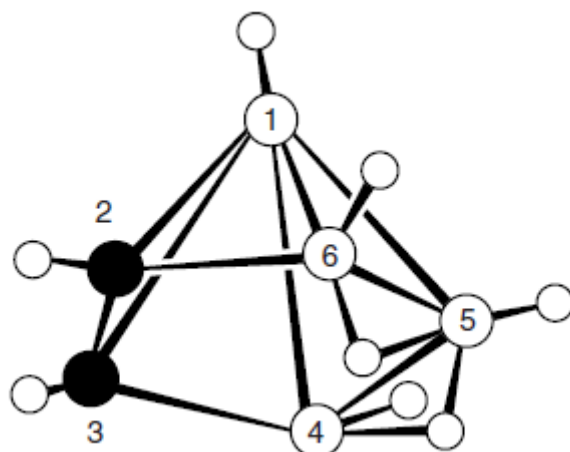
1.  $B_{10}C_2H_{12}$
2.  $B_3C_2H_5$

dikarba-*kloso*-dodekaboran(12)



1,5-dikarba-*kloso*-pentaboran(5)

3.  $B_4C_2H_8$

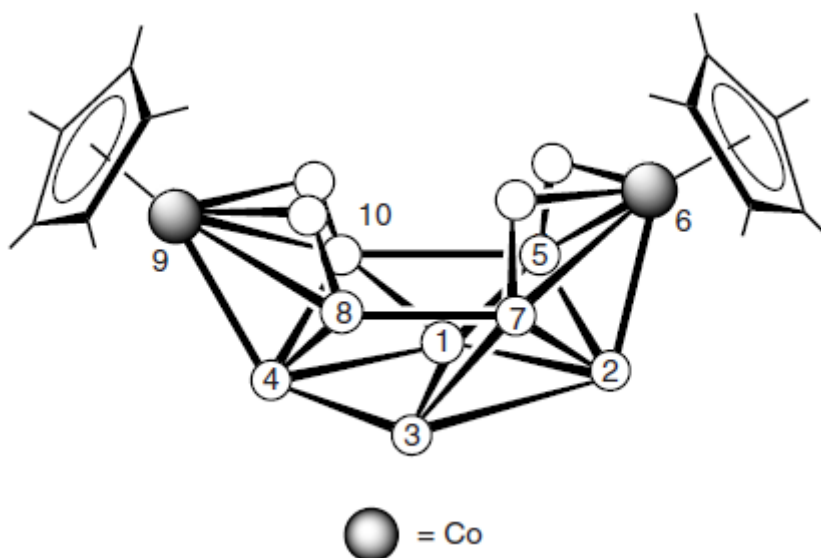


4,5:5,6-di- $\mu$ H-2,3-dikarba-*nido*-heksaboran(8)

Przy numeracji najważniejsze są lokanty określające położenie heteroatomów w szkielecie, a dopiero potem lokanty mostkowych atomów wodoru. Chociaż heteroborany i odpowiadające im macierzyste poliborany mogą mieć różną liczbę mostkowych atomów wodoru, przy numeracji uwzględnia się tylko układ atomów boru w szkielecie macierzystym.

Przykłady:

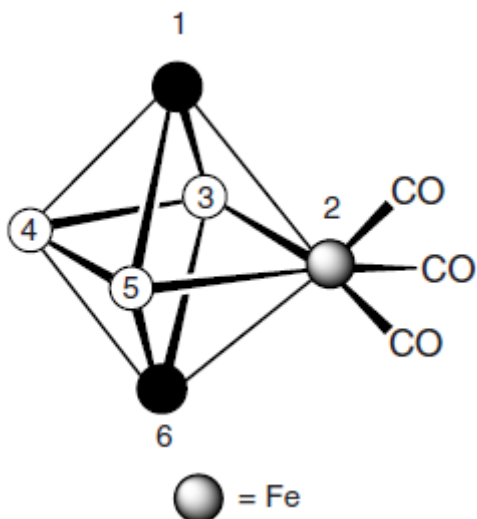
4.



6,9-bis(pentametylo- $\eta^5$ -cyklopentdienylo)-5,6:6,7:8,9:9,10-tetra- $\mu$ H-6,9-dikobalto-*nido*-dekaboran(12) (pominięto terminalne atomy H przy każdym atomie B)

5.





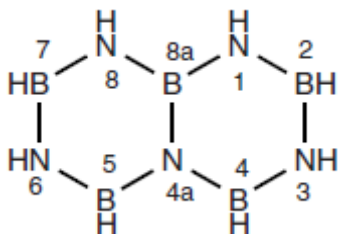
2,2,2-trikarbonylo-1,6-dikarba-2-żelazo-*kloso*-heksaboran(5)  
(pominięto terminalne atomy H przy B i C)

#### IIR-6.2.4.5 Heterojądrowe policykliczne wodorki macierzyste

Nazwy macierzyste związków heterojądrowych policyklicznych można tworzyć trzema metodami:

- (i) przez określenie sposobu skondensowania odpowiednich układów monocyklicznych (patrz Sekcja P-25.3 pozycji literaturowej nr 1), nazwanych według systemu Hantzsch-Widmana (patrz Sekcja IR-6.2.4.3);
- (ii) przez użycie przedrostków zamiennych (określenie 'a') z Tabeli X do określenia zastąpienia atomów węgla w odpowiednim związku karbocyklicznym. Heteroatomy wymienia się w kolejności podanej w Tabeli VI, dodając odpowiednie przedrostki wielokrotniające;
- (iii) w przypadku układów pierścieniowych składających się z powtarzających się jednostek, przez zastosowanie notacji von Baeyera do określenia struktury pierścienia w połączeniu z odpowiednim przedrostkiem wielokrotniającym i przedrostkami zamiennymi z Tabeli X odpowiednimi dla powtarzającej się jednostki, por. nazwy omówione w Sekcji IR-6.2.4.2.

Przykład:



Numeracja dotyczy tylko metody (ii)

- (i) oktahydro[1,3,5,2,4,6]triazatriborinino[1,3,5,2,4,6]triazatriborinina
- (ii) oktahydro-1,3,4a,6,8-pentaaza-2,4,5,7,8a-pentaborononaftalen
- (iii) bicyklo[4.4.0]pentaborazan

W tym przypadku nazwy (i) i (ii) muszą zawierać przedrostek 'oktahydro', gdyż wyjściowe związki macierzyste (triazatriborynina i naftalen) mają maksymalną możliwą liczbę wiązań podwójnych. Dodanie 'oktahydro' wskazuje na pełne uwodornienie tych struktur.

## IR-6.3 Nazwy podstawnikowe pochodnych wodorków macierzystych

### IR-6.3.1 Zastosowanie przyrostków i przedrostków

Grupy podstawnikowe (lub podstawniki), traktowane jako zastępujące atomy wodoru w wodorkach macierzystych, nazywa się używając odpowiednich przyrostków ('ol', 'tiol', 'peroksol', 'kwas karboksylowy' itd.) oraz przedrostków ('hydroksy', 'fosfanyl', 'bromo', 'nitro' itd.). Hierarchię przyrostków podstawnikowych podano w Sekcji P-43 pozycji literaturowej nr 1. Obszerną listę przedrostków zawiera Załącznik 2 tego dokumentu.

Przypadek podstawników utworzonych przez usunięcie jednego lub więcej atomów wodoru z wodorku macierzystego jest krótko wyjaśniony, wraz z przykładami, w Sekcji IR-6.4.7, a przedrostki dla wielu powszechnych podstawników nieorganicznych znajdują się w Tabeli IX.

Niektóre podstawniki, szczególnie atomy halogenów, zawsze występują jako przedrostki. W pozostałych przypadkach podstawnik o najwyższej randze (główna grupa charakterystyczna) jest oznaczany przyrostkiem, a pozostałe podstawniki przedrostkami. Z wyjątkiem przedrostka 'hydro', przedrostki wymienia się w porządku alfabetycznym przed nazwą wodorku macierzystego, używając nawiasów dla uniknięcia niejednoznaczności.

Przedrostki zwielokrotniające wskazują na obecność dwóch lub więcej identycznych podstawników; jeśli same podstawniki są podstawione, używa się przedrostków 'bis', 'tris', 'tetrakis' itd. W przypadku przedrostka zwielokrotniającego kończącego się na 'a' i przyrostka zaczynającego się od samogłoski, 'a' jest pomijane (patrz Przykład 2). Końcowe 'e' w nazwie wodorku macierzystego jest pomijane przed przyrostkiem zaczynającym się od samogłoski (patrz Przykłady 1 i 5).

Gdy istnieje możliwość wyboru wodorku macierzystego spośród wymienionych w Tabeli IR-6.1 (lub odpowiadających im wodorków o niestandardowych liczbach wiązań, por. Sekcja IR-6.2.2.2), nazwę tworzy się w oparciu o wodorek macierzysty pierwiastka występującego jako pierwszy w sekwencji: N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, Tl, O, S, Se, Te, C, F, Cl, Br, I.

Powyższe omówienie stanowi jedynie bardzo krótki przegląd najważniejszych zasad nomenklatury podstawnikowej. W dokumencie źródłowym rozwinięto obszerny system reguł wyboru jednej nazwy spośród wielu jednoznacznych nazw podstawnikowych, które często można utworzyć dla związków organicznych. Odpowiedni rozbudowany zestaw reguł nie został opracowany dla związków niezawierających węgla, częściowo dlatego, że dla wielu takich związków można równie dobrze stosować nazwy addytywne (Rozdział IR-7), co często ma miejsce.

Poniższe przykłady ilustrują omówione zasady. Dla porównania dodano także niektóre nazwy addytywne.

Przykłady:

1. SiH<sub>3</sub>OH silanol
2. Si(OH)<sub>4</sub> silanotetrol (podstawnikowa) lub tetrahydroksydokrzem (addytywna)
3. SF<sub>6</sub> heksafluoro-λ<sup>6</sup>-sulfan (podstawnikowa) lub heksafluoridosiarka (addytywna)
4. TiH<sub>2</sub>CN talanocyjanek (podstawnikowa) lub cyjanidodihydroksytal (addytywna)
5. SiH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> silanoamina (podstawnikowa) lub amidotrihydroksydokrzem (addytywna)

6.  $\text{PH}_2\text{Cl}$  chlorofosfan
7.  $\text{PH}_2\text{Et}$  etylofosfan
8.  $\text{TiH}_2\text{OOOTiH}_2$  trioksydanodiylobis(talan)
9.  $\text{PbEt}_4$  tetraetyloplumban (podstawnikowa) lub tetraetylołów (addytywna)
10.  $\text{GeH}(\text{SMe})_3$  tris(metylotianylo)german
11.  $\text{PhGeCl}_2\text{SiCl}_3$  trichloro[dichloro(fenylo)germylo]silan, a nie dichloro(fenylo)(trichlorosilylo)german
12.  $\text{MePHSiH}_3$  metylo(silylo)fosfan, a nie (metylofosfinanylo)silan lub (silylofosfinanylo)metan

W przypadku wielordzeniowych wodorków macierzystych często potrzebne są lokanty numeryczne do określenia położenia grup podstawnikowych. Gdy po zastosowaniu odpowiednich reguł z Sekcji IR-6.2 istnieje kilka równoważnych sposobów numerowania atomów szkieletu wodorku macierzystego względem podstawników, wybiera się taką numerację, która daje najniższy zestaw lokantów dla całego związku. Jeśli nadal istnieje możliwość wyboru, najniższe lokanty przypisuje się podstawnikowi wymienianemu jako pierwszy w nazwie. W przypadku gdy wszystkie podstawialne atomy wodoru zostają zastąpione tym samym podstawnikiem, można pominąć lokanty, jak pokazano w Przykładzie 20.

Przykłady:

13.  $\text{H}_3\text{GeGeGeH}_2\text{GeBr}_3$  4,4,4-tribromo- $2\lambda^2,2\lambda^2,2\lambda^2$ -tetragerman  
(numerację związku macierzystego ustala lokant  $\lambda$ )

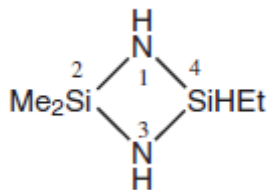
14.  $\text{HOOC-SiH}_2\text{-SiH}_2\text{-SiH}_3$  kwas trisylo-1-karboksylowy

15.  $\text{HN=NNHMe}$  3-metylotriaz-1-en (a nie 1-metylotriaz-3-en)  
(numerację szkieletu określa położenie wiązania podwójnego)

16.  $\text{ClSiH}_2\text{SiHClSiH}_2\text{SiHSiH}_2\text{Cl}$  1,2,5-trichloropentasilan (a nie 1,4,5-)

17.  $\text{BrSnH}_2\text{SnCl}_2\text{SnH}_2\text{C}_3\text{H}_7$  1-bromo-2,2-dichloro-3-propylotrójstannan  
(bromo ma pierwszeństwo przed propylem przy najniższym lokancie)

18.  $\text{HSnCl}_2\text{OSnH}_2\text{OSnH}_2\text{OSnH}_2\text{Cl}$  1,1,7-trichlorotetrastannoksynan  
19.



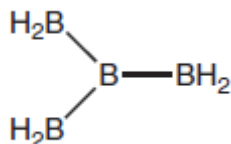
4-etylo-2,2-dimetylocyklodisilazan  
Nazwa H-W: 4-etylo-2,2-dimetylo-1,3,2,4-diazadisiletan  
(zestaw lokantów 2,2,4 ma pierwszeństwo przed 2,4,4 w obu nazwach)

20. Et<sub>3</sub>PbPbEt<sub>3</sub> 1,1,1,2,2,2-heksaetylodiploplumban lub  
 heksaetylodiploplumban (podstawnikowa) lub bis(trietylołów)(Pb-Pb) (addytywna)  
 21. MeNHN=NMe 1,3-dimetylotriaz-1-en

Nazwy związków rozgałęzionych tworzy się wybierając najdłuższy prosty łańcuch jako związek macierzysty, a pozostałe, krótsze łańcuchy traktuje się jako podstawniki. Numerację najdłuższego łańcucha prowadzi się tak, aby podstawniki miały jak najniższe numery.

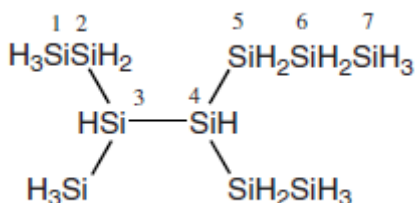
Przykłady:

22.



2-boranylotriboran(5)

23.

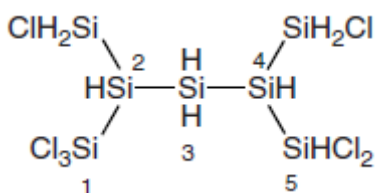


4-disilanylo-3-silyloheptasilan  
 (a nie 4-disilanylo-5-silyloheptasilan)

Jeśli nie można wybrać głównego łańcucha tylko na podstawie jego długości, kolejnym kryterium wyboru jest nienasycenie, a następnie największa liczba podstawników.

Przykład:

24.



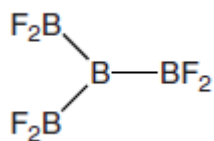
1,1,1,5,5-pentachloro-2,4-bis(chlorosilil)pentasilan  
 (wszystkie inne pięciokrzemowe łańcuchy mają mniej podstawników)

### IR-6.3.2 Podstawienie wodoru w wodorkach boru

Nazwy pochodnych wodorków boru, w których atomy wodoru zostały zastąpione grupami podstawnikowymi, tworzy się według procedur podanych w Sekcji IR-6.3.1. Jediną szczególną cechą jest konieczność określenia zastąpienia mostkowego atomu wodoru - w takim przypadku przed nazwą grupy podstawnikowej używa się oznaczenia 'μ-', jak pokazano w Przykładzie 4.

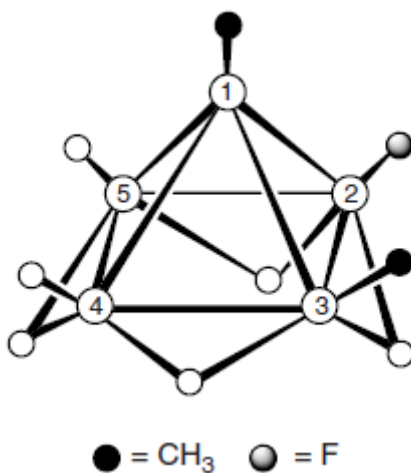
Przykłady:

1.



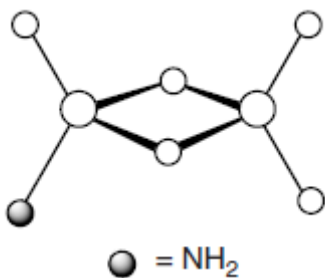
2-(difluoroboranylo)-1,1,3,3-tetrafluorotriboran(5)

2.



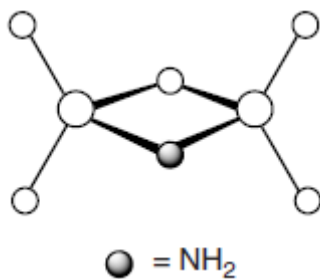
2-fluoro-1,3-dimetylopentaboran(9) lub  
2-fluoro-1,3-dimetylo-2,3:2,5:3,4:4,5-tetra- $\mu$ H-*nido*-pentaboran(9)

3.



diboran(6)amina

4.



diboran(6)- $\mu$ -amina

#### IR-6.4 Nazwy jonów i rodników pochodzących od wodorków macierzystych

W tej sekcji przedstawiono nazwy jonów i rodników, które formalnie można wyprowadzić z wodorków poprzez usunięcie lub dodanie atomów wodoru, jonów wodorkowych lub hydronów

(jonów  $H^+$ ). Wiele jonów i rodników można również nazywać metodami addytywnymi, co opisano w Rozdziale IR-7. Nazwy wielu prostych jonów i rodników, często w obu systemach nomenklatury, znajdują się w Tabeli IX.

#### IR-6.4.1 Kationy powstałe z wodoroków macierzystych przez przyłączenie jednego lub więcej hydronów

Nazwę jonu powstałego formalnie przez dodanie hydronu do wodoroku macierzystego tworzy się dodając przyrostek 'ium' do nazwy wodoroku macierzystego, z pominięciem końcowego 'e'. Dla polikationów utworzonych w ten sposób używa się przyrostków 'dium', 'trium' itd., bez pomijania końcowego 'e' w nazwie wodoroku macierzystego. Niezbędne lokanty umieszcza się bezpośrednio przed przyrostkiem. Lokanty dla dodanych hydronów mają pierwszeństwo przed lokantami określającymi nienasylenie, jak pokazano w Przykładzie 8.

Alternatywne nazwy: amonium, hydrazynium, hydrazynediium i oksonium są używane przy tworzeniu nazw pochodnych organicznych (patrz Sekcja IR-6.4.3 i Sekcja P-73.1 pozycji literaturowej nr 1).

Przykłady:

1.  $NH_4^+$  azanium lub amonium
2.  $N_2H_5^+$  diazanium lub hydrazynium
3.  $N_2H_6^{2+}$  diazaniediium lub hydrazynediium
4.  $H_3O^+$  oksydanium lub oksonium (nie hydronium)
5.  $H_4O^{2+}$  oksydaniediium
6.  $H_3O_2^+$  dioksydanium
7.  $^+H_3PPHPH_3^+$  trifosfano-1,3-dium
8.  $^+H_3NN=NH$  triaz-2-en-1-ium

#### IR-6.4.2 Kationy powstałe z wodoroków macierzystych przez utratę jednego lub więcej jonów wodorokowych

Kation powstały przez formalne oderwanie jonu wodorokowego od wodoroku macierzystego nazywa się dodając przyrostek 'ylium' do nazwy związku macierzystego, z pominięciem końcowego 'e'. W przypadku polikationów utworzonych w ten sposób używa się przyrostków 'diylium', 'triylium' itd., bez pomijania końcowego 'e' w nazwie wodoroku macierzystego. Wszelkie niezbędne lokanty umieszcza się bezpośrednio przed przyrostkiem. Lokanty dla usuniętych jonów wodorokowych mają pierwszeństwo przed lokantami określającymi nienasylenie, jak pokazano w Przykładzie 5.

W przypadku nazw silan, german, stannan i plumban, jak również wielu nazw węglowodorów, przyrostek 'ylium' zastępuje końcówkę 'an' wodoroku macierzystego (por. Sekcja P-73.2 pozycji literaturowej nr 1).

Przykłady:

1.  $PH_2^+$  fosfanylium
2.  $Si_2H_5^+$  disilanylium
3.  $SiH_3^+$  silylium
4.  $BH_2^+$  boranylium
5.  $^+HNN=NH$  triaz-2-en-1-ylium

### IR-6.4.3 Kationy podstawione

Nazwy pochodnych podstawionych kationów tworzy się z modyfikowanych nazw wodorków macierzystych (jak opisano w IR-6.4.1 i IR-6.4.2) przez dodanie odpowiednich przedrostków podstawnikowych. Przy numerowaniu pochodnych wielordzeniowych związków macierzystych, lokanty dla dodanych hydronów lub usuniętych jonów wodorkowych mają pierwszeństwo przed lokantami podstawników, jak pokazano w Przykładzie 6.

Przykłady:

- |  |   |
|--|---|
| 1. $[\text{NF}_4]^+$                     | tetrafluoroazanium lub tetrafluoroamonium |
| 2. $[\text{PCl}_4]^+$                    | tetrachlorofosfanium                      |
| 3. $[\text{NMe}_4]^+$                    | tetrametyloazanium lub tetrametyloamonium |
| 4. $[\text{SEtMePh}]^+$                  | etylo(metylo)fenylosulfanium              |
| 5. $[\text{MeOH}_2]^+$                   | metylooksydanium lub metyloaksonium       |
| 6. $[\text{ClP}(\text{H})\text{PH}_3]^+$ | 2-chlorodifosfan-1-ium                    |

### IR-6.4.4 Aniony powstałe z wodorków macierzystych przez utratę jednego lub więcej hydronów

Anion powstały formalnie przez usunięcie jednego lub więcej hydronów z wodorku macierzystego nazywa się dodając 'id', 'diid' itd. do nazwy macierzystej, z pominięciem końcowego 'e' przed 'id', ale nie w innych przypadkach. Wszelkie niezbędne lokanty umieszcza się bezpośrednio przed przyrostkiem. Lokanty dla usuniętych hydronów mają pierwszeństwo przed lokantami określającymi nienasylenie, jak pokazano w Przykładzie 10.

Przykłady:

- |                               |                                       |
|-------------------------------|---------------------------------------|
| 1. $\text{NH}_2^-$            | azanid lub amid                       |
| 2. $\text{NH}^{2-}$           | azandiid lub imid                     |
| 3. $\text{H}_2\text{NNH}^-$   | diazanid lub hydrazynid               |
| 4. $\text{H}_2\text{NN}^{2-}$ | diazan-1,1-diid lub hydrazyn-1,1-diid |
| 5. $^-\text{HNNH}^-$          | diazan-1,2-diid lub hydrazyn-1,2-diid |
| 6. $\text{SiH}_3^-$           | silanid                               |
| 7. $\text{GeH}_3^-$           | germanid                              |
| 8. $\text{SnH}_3^-$           | stannanid                             |
| 9. $\text{SH}^-$              | sulfanid                              |
| 10. $^-\text{HNN}=\text{NH}$  | triaz-2-en-1-id                       |

Nazwy anionów powstałych przez formalne oderwanie jednego lub więcej hydronów z grup hydroksylowych i ich analogów chalkogenowych (charakteryzujących się przyrostkami takimi jak 'ol' i 'tiol') tworzy się dodając końcówkę 'an' do odpowiedniej nazwy.

Przykłady:

- |                              |                   |
|------------------------------|-------------------|
| 11. $\text{SiH}_3\text{O}^-$ | silanol-an        |
| 12. $\text{PH}_2\text{S}^-$  | fosfanetioliol-an |

Anion w Przykładzie 12 można również nazwać jako pochodną kwasu fosfotianowego,  $\text{H}_2\text{PSH}$ , otrzymując nazwę 'fosfotian'. Ten typ nazwy jest używany jako podstawa do nazywania pochodnych organicznych  $\text{H}_2\text{PSH}$ . (więcej w Rozdziale IR-8.)

### IR-6.4.5 Aniony powstałe z wodorków macierzystych przez przyłączenie jednego lub więcej jonów wodorkowych

Przyłączenie jonu wodorkowego do wodorku macierzystego oznacza się końcówką 'uid' (patrz Sekcja P-72.3 pozycji literaturowej nr 1). Zasady dotyczące lokantów są analogiczne do zasad dla przyrostka 'id' (patrz Sekcja IR-6.4.4). Dla związków tego typu nazwy addytywne (Rozdział IR-7) są powszechnymi i akceptowalnymi alternatywami.

Przykład:

1.  $[\text{BH}_4]^-$  boranuid (od boranu) lub tetrahydrydoboran( $1^-$ ) (nazwa addytywna)

### IR-6.4.6 Aniony podstawione

Nazwy pochodnych podstawionych anionów tworzy się z nazw wodorków macierzystych zmodyfikowanych jak wyżej (patrz Sekcje IR-6.4.4 i IR-6.4.5) przez dodanie odpowiednich przedrostków dla podstawników. Przy numerowaniu struktury pozycja, z której usunięto hydron lub do której dodano jon wodorkowy ma pierwszeństwo przed pozycjami z podstawnikami, jak pokazano w Przykładzie 4. W wielu przypadkach nazwy addytywne są powszechnie stosowanymi i akceptowalnymi alternatywami.

Przykłady:

1.  $\text{SnCl}_3^-$  trichlorostananid (od stananu), lub trichlorydostanian( $1^-$ ) (nazwa addytywna)
2.  $\text{MePH}^-$  metylofosfanid
3.  $\text{MeNH}^-$  metyloazanid lub metyloamid lub metanoaminid (wszystkie nazwy podstawnikowe, patrz Sekcja P-72.2 pozycji literaturowej nr 1)
4.  ${}^1\text{-SnH}_2\text{O}{}^2\text{SnH}_2\text{O}{}^3\text{SnH}_2\text{O}{}^4\text{SnH}_2\text{O}{}^5\text{SnH}_2\text{O}{}^6\text{SnH}_2\text{O}{}^7\text{SnH}_2\text{O}{}^8\text{SnH}_2\text{O}{}^9\text{SnCl}_3$  9,9,9-trichloropentastannoksan-1-id
5.  $[\text{BH}_3\text{CN}]^-$  cyjanoboranuid (od boranu), lub cyjanidotrihydrydoboran( $1^-$ ) (nazwa addytywna)
6.  $[\text{PF}_6]^-$  heksafluoro- $\lambda^5$ -fosfanuid (od fosfanu), lub heksafluorydofosforan( $1^-$ ) (nazwa addytywna)

### IR-6.4.7 Rodniki i grupy podstawnikowe

Rodniki i grupy podstawnikowe powstałe z wodorków macierzystych przez usunięcie jednego lub więcej atomów wodoru nazywa się modyfikując nazwę wodorku macierzystego w następujący sposób:

- (i) usunięcie jednego atomu wodoru: dodaje się przyrostek 'yl' (z pominięciem końcowego 'e' w nazwie wodorku macierzystego);
- (ii) usunięcie dwóch lub więcej atomów wodoru: dodaje się przyrostek 'yl' z odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym (bez pomijania samogłosek).



Przyrostek 'yliden' stosuje się dla grupy podstawnikowej, jeśli zakłada się wiązanie podwójne, gdy atom szkieletowy formalnie stracił dwa atomy wodoru. Jeśli zakłada się wiązanie potrójne, używa się końcówki 'ylidyn'. Przy tych końcówkach końcowe 'e' nazwy wodorku macierzystego jest pomijane.

Dla rodników, jeśli dwa wodory zostały usunięte z tego samego atomu, stosuje się przyrostek 'yliden'.

Lokanty mogą być potrzebne do wskazania atomów szkieletowych, z których usunięto atomy wodoru. Takie lokanty umieszcza się bezpośrednio przed przyrostkiem. Przy numerowaniu struktury pozycje, z których usunięto atomy wodoru, mają pierwszeństwo przed nienasyceciem, jak w Przykładzie 9.

Rodniki można również nazywać używając nomenklatury addytywnej (patrz Sekcja IR-7.1.4 i przykłady w kolejnych sekcjach Rozdziału IR-7).

Przykłady:

1. $\text{NH}_2^{\bullet}$	azanyliden
2. $\text{PH}_2^{\bullet}$ i $\text{H}_2\text{P}-$	fosfanyl
3. $\text{PH}_2^{\bullet}$ i $\text{HP}=\text{}$	fosfanyliden
4. $\text{HP}<$	fosfanediyl
5. $\text{P}\equiv$	fosfanylidyn
6. $\text{H}_2\text{Br}^{\bullet}$ i $\text{H}_2\text{Br}-$	$\lambda^3$ -bromanyl
7. $\text{H}_2\text{NNH}^{\bullet}$ i $\text{H}_2\text{NNH}-$	diazanyl lub hydrazynyl
8. $^{\bullet}\text{HNNH}$ i $-\text{HNNH}-$	diazan-1,2-diyl lub hydrazyn-1,2-diyl
9. $\text{HP}=\text{NP}^{\bullet}\text{NHPH}^{\bullet}$ i $\text{HP}=\text{NP} \text{NHPH}-$	trifosfaz-4-en-1,3-diyl

W wielu przypadkach, przyjęta nazwa grupy podstawnikowej lub rodnika jest niesystematyczna lub jest krótszą wersją utworzoną przez zastąpienie końcówki 'an' w nazwie macierzystej przyrostkiem 'yl' lub 'yliden':

Przykłady:

10. $\text{OH}^{\bullet}$	hydroksyl (zamiast oksydanyl)
11. $\text{OH}-$	hydroksy (zamiast oksydanyl)
12. $\text{NH}_2^{\bullet}$	aminy (zamiast azanyl)
13. $\text{NH}_2-$	amino (zamiast azanyl)
14. $\text{CH}_2^{\bullet}$	metyliden (zamiast metanyliden), lub $\lambda^2$ -metan, lub karben
15. $\text{SiH}_3^{\bullet}$ i $\text{SiH}_3-$	silil (zamiast silanyl)
16. $\text{GeH}_3^{\bullet}$ i $\text{GeH}_3-$	germyl (zamiast germanyl)
17. $\text{SnH}_3^{\bullet}$ i $\text{SnH}_3-$	stanyl (zamiast stannanyl)
18. $\text{PbH}_3^{\bullet}$ i $\text{PbH}_3-$	plumbyl (zamiast plumbanyl)
19. $\text{SiH}_2^{\bullet}$	silyliden

Ta lista jest wyczerpująca w odniesieniu do wodorków niezawierających węgla. Dla wodorków zawierających węgiel stosuje się również szereg skróconych lub całkowicie niesystematycznych nazw: metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl, heksyl, cykloheksyl, fenyl, naftyl, itd.

#### IR-6.4.8 Podstawione rodniki lub grupy podstawnikowe

Rodniki lub grupy podstawnikowe powstałe formalnie przez usunięcie jednego lub więcej atomów wodoru i wprowadzenie podstawników w wodorkach macierzystych nazywa się używając przedrostków dla podstawników, jak wyjaśniono w Sekcji IR-6.3.1. Pozycje, z których usunięto atomy wodoru, mają pierwszeństwo przed pozycjami z podstawnikami. Kilka prostych takich rodników i grup podstawnikowych nazwano w Tabeli IX. W niektórych przypadkach nazwa rodnika i odpowiadającej mu grupy podstawnikowej używana w nomenklaturze organicznej może się różnić (patrz Przykład 2).

Przykłady:

- |  |   |
|--|---|
| 1. $\text{NH}_2\text{O}^+$ i $\text{NH}_2\text{O}^-$               | aminooksydanyl  |
| 2. $\text{HONH}^+$<br>$\text{HONH}^-$                              | hydroksyazanyl<br>hydroksyamino   |
| 3. $\text{Me}_3\text{PbPbMe}_2^+$ i $\text{Me}_3\text{PbPbMe}_2^-$ | 1,1,2,2,2-pentametylodiplumban-1-yl<br>(nie: 1,1,1,2,2-pentametylodiplumban-2-yl) |

#### IR-6.4.9 Centra anionowe i kationowe oraz rodniki w pojedynczej cząsteczce lub jonie

Jeśli w cząsteczce lub jonie występuje kilka z powyższych cech [fragment kationowy, fragment anionowy, rodnik utworzony przez usunięcie atomu(ów) wodoru], potrzebna jest reguła określająca kolejność wymieniania różnych modyfikacji nazwy wodorku macierzystego.

Kolejność jest następująca:

kation < anion < rodnik

w tym sensie, że:

- (i) przyrostki wskazujące te modyfikacje wymienia się w tej właśnie kolejności;
- (ii) najniższe lokanty przypisuje się pozycjom, z których usunięto atomy wodoru (jeśli występują); miejsca anionowe (jeśli są) numeruje się używając następnich najniższych lokantów; na końcu numeruje się miejsca kationowe. Wszystkie te pozycje mają pierwszeństwo przed nienasyceciem i przed podstawnikami oznaczanymi przedrostkami.

Przykłady:

- |  |  |
|--|--|
| 1. $\text{H}_2\text{Te}^{*+}$  | telaniumyl   |
| 2. $\text{H}_2\text{Te}^{*-}$  | telanuidyl   |
| 3. $\text{Me}_3\text{N}^+-\overset{2}{\text{N}}^--\overset{1}{\text{Me}}$                  | 1,2,2,2-tetrametylodiazan-2-ium-1-id                   |
| 4. $\text{MeN}=\overset{3}{\text{N}}^+-\overset{2}{\text{N}}^--\overset{1}{\text{SiMe}_3}$ | 3-metylo-1-(trimetylosililo)triaz-2-en-2-ium-1-id-2-yl |

Dodatkowe komplikacje pojawiają się przy nazywaniu grupy podstawnikowej zawierającej centrum rodnikowe (patrz Sekcja P-71.5 pozycji literaturowej nr 1).

#### IR-6.5 Literatura

1. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, red. W.H. Powell i H. Favre, Royal Society of Chemistry, w przygotowaniu.
2. K. Wade, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, 18, 1–66 (1976); R.E. Williams, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, 18, 67–142 (1976); D.M.P. Mingos, *Acc. Chem. Res.*, 17, 311–319 (1984).
3. R.W. Rudolph i W.R. Pretzer, *Inorg. Chem.*, 11, 1974–1978 (1972); R.W. Rudolph, *Acc. Chem. Res.*, 9, 446–452 (1976).

## **IR-7 NOMENKLATURA ADDYTYWNA**

### **SPIS TREŚCI**

#### **IR-7.1 Wprowadzenie**

##### **IR-7.1.1 Informacje ogólne**

##### **IR-7.1.2 Wybór atomu centralnego lub atomów, bądź struktury łańcuchowej lub pierścieniowej**

##### **IR-7.1.3 Przedstawianie ligandów w nazwach addytywnych**

##### **IR-7.1.4 Jony i rodniki**

#### **IR-7.2 Związki monojądrowe**

#### **IR-7.3 Związki polijądrowe**

##### **IR-7.3.1 Symetryczne związki dwujądrowe**

##### **IR-7.3.2 Niesymetryczne związki dwujądrowe**

##### **IR-7.3.3 Związki oligojądrowe**

#### **IR-7.4 Łańcuchy i pierścienie nieorganiczne**

##### **IR-7.4.1 Informacje ogólne**

##### **IR-7.4.2 Deskryptor węzłowy**

##### **IR-7.4.3 Konstruowanie nazw**

##### **IR-7.5 Bibliografia**

## **R-7 Nomenklatura addytywna**

### **IR-7.1 WPROWADZENIE**

#### **IR-7.1.1 Informacje ogólne**

Nomenklatura addytywna została pierwotnie opracowana dla związków koordynacyjnych typu Wernera, które postrzegano jako złożone z atomu centralnego (lub atomów) otoczonego przez przyłączone grupy znane jako ligandy. Jednakże wiele innych typów związków może również otrzymywać nazwy addytywne. Nazwy te tworzy się poprzez umieszczenie nazw ligandów (czasami zmodyfikowanych) jako przedrostków do nazw(y) atomu(ów) centralnego(ych).

Niniejszy rozdział omawia ogólną charakterystykę nomenklatury addytywnej i przedstawia przykłady nazw addytywnych dla prostych związków mono- i polijądrowych. Związki łańcuchowe i pierścieniowe są następnie omawiane przy użyciu zasad addytywnych uzupełnionych o dodatkowe konwencje. Nazwy addytywne kwasów nieorganicznych są omówione w rozdziale IR-8. Nomenklatura addytywna w zastosowaniu do związków koordynacyjnych metali jest szczegółowo opisana w rozdziale IR-9 (gdzie schemat blokowy, Rysunek IR-9.1, przedstawia ogólną procedurę nazewnictwa związków koordynacyjnych). Nazwy addytywne dla dużej liczby prostych związków podano w Tabeli IX<sup>1</sup>.

Należy zauważyć, że w niektórych przypadkach związek nazwany metodą addytywną może być alternatywnie i równie systematycznie nazwany metodą podstawnikową w oparciu o odpowiednio wybraną strukturę macierzystą (Rozdział IR-6). Ważne jest jednak, aby pamiętać, że nazwy addytywne dla wodorków macierzystych nie mogą być używane jako nazwy macierzyste w nomenklaturze podstawnikowej.

#### **IR-7.1.2 Wybór atomu centralnego lub atomów, bądź struktury łańcuchowej lub pierścieniowej**

Wybór atomu centralnego lub atomów jest kluczowym etapem w procesie nadawania nazwy związkowi przy użyciu nomenklatury addytywnej. Jeśli w związku występują atomy metali (jeden lub więcej), należy je wybrać jako atom(y) centralny(e). Taki(e) atom(y) powinien(ny) również zajmować względnie centralne położenie w strukturze i, gdy to możliwe, należy je wybierać tak, aby wykorzystać symetrię molekularną (co skraca nazwę). Zazwyczaj przy wyborze atomów centralnych pomija się atomy wodoru.

Dla niektórych związków nadal może pozostać wybór atomu centralnego lub atomów. Atom(y), który(e) występuje(a) najpóźniej zgodnie ze strzałką w Tabeli VI, powinien(ny) zostać wybrany(e) jako atom(y) centralny(e).

Jeśli zgodnie z powyższymi kryteriami w strukturze występuje więcej niż jeden atom centralny, związek można nazwać jako związek dijądrowy lub polijądrowy.

Alternatywnie do powyższej procedury, można wybrać grupę atomów tworzącą podstrukturę łańcuchową lub pierścieniową w związku w celu utworzenia nazwy addytywnej z wykorzystaniem nomenklatury łańcuchów i pierścieni opisanej w Sekcji IR-7.4.

#### **IR-7.1.3 Przedstawianie ligandów w nazwach addytywnych**

Nazwy addytywne tworzy się poprzez umieszczenie nazw ligandów (czasami zmodyfikowanych) jako przedrostków do nazwy atomu centralnego. W przypadku ligandów anionowych, końcówki 'ek', 'an' i 'yn' są zamieniane odpowiednio na 'ido', 'ano' i 'ino' podczas tworzenia tych przedrostków. Nazwy ligandów obojętnych i kationowych pozostają

---

<sup>1</sup> Tabele oznaczone cyframi rzymskimi są zebrane razem na końcu tej książki.

niezmienione, z wyjątkiem kilku szczególnych przypadków, najbardziej znanych jak woda (przedrostek 'akwa'), amoniak (przedrostek 'amina'), tlenek węgla związany przez węgiel (przedrostek 'karbonyl') i tlenek azotu związany przez azot (przedrostek 'nitrozyl') (por. Sekcja IR-9.2.4.1).

Z zasady jest kwestią konwencji, czy ligand jest uznawany za anionowy, obojętny czy kationowy. Domyślnie ligandy traktuje się jako anionowe, stąd OH to 'hydroksido', Cl 'chlorido', SO<sub>4</sub> siarczano', itd. Niektóre ligandy są konwencjonalnie traktowane jako obojętne, np. aminy i fosfiny oraz ligandy pochodzące od węglowodorów poprzez usunięcie atomu wodoru, takie jak metyl, benzyl, itd.

Odpowiednie przedrostki do przedstawiania wielu prostych ligandów w nazwach podano w Tabeli IX. Więcej szczegółów znajduje się w Sekcji IR-9.2.2.3.

#### IR-7.1.4 Jony i rodniki

W nomenklaturze addytywnej związki anionowe otrzymują końcówkę 'an', podczas gdy dla związków kationowych lub obojętnych nie stosuje się specjalnego zakończenia. Nazwy addytywne jonów kończą się numerem ładunku (patrz Sekcja IR-5.4.2.2). W nazwach addytywnych rodników charakter rodnikowy związku może być oznaczony kropką rodnikową, •, dodaną w nawiasach i wycelowaną po nazwie związku. Wielorodniki oznacza się odpowiednią liczbą umieszczoną przed kropką. Na przykład, dirodnik oznacza się jako '(2•)'.  
•

Nazwy związków monojądrowych i jonów, czyli indywidualów z pojedynczym atomem centralnym, tworzy się przez wymienienie odpowiednich przedrostków dla ligandów w porządku alfabetycznym przed nazwą atomu centralnego. Ligandy występujące więcej niż jeden raz są grupowane w nazwie za pomocą przedrostków zwielokrotniających (Tabela IV), tj. 'di', 'tri', 'tetra' itd. dla prostych ligandów, takich jak chlorido, benzyl, akwa, amina i hydroksido, oraz 'bis', 'tris', 'tetrakis' itd. dla bardziej złożonych ligandów, np. 2,3,4,5,6-pentachlorobenzyl i trifenylfosfina. Te ostatnie przedrostki są również stosowane w celu uniknięcia niejednoznaczności, która mogłaby wystąpić przy użyciu 'di', 'tri' itd. Przedrostki zwielokrotniające, które nie są nieodłączną częścią nazwy ligandu, nie wpływają na kolejność alfabetyczną.

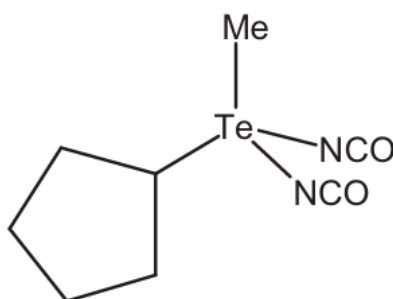
Przedrostki reprezentujące ligandy mogą być oddzielone za pomocą znaków zamykających (patrz także Sekcja IR-9.2.2.3), i powinno się to stosować dla wszystkich ligandów z wyjątkiem najprostszych, włączając ligandy organiczne. W niektórych przypadkach użycie znaków zamykających jest niezbędne w celu uniknięcia niejednoznaczności, jak pokazano w Przykładach 10 i 11 poniżej.

W kilku przykładach poniżej podano również nazwy podstawnikowe (patrz Rozdział IR-6). Jednak w niektórych przypadkach nie ma dostępnego wodorku macierzystego do utworzenia nazwy podstawnikowej (patrz Przykłady 9 i 11). Należy również zauważyć, że wzory podane poniżej w nawiasach kwadratowych są wzorami typu związku koordynacyjnego, gdzie atom centralny jest wymieniony jako pierwszy.

Przykłady:

1. Si(OH)<sub>4</sub> - tetrahydroksidokrzem (addytywna),  
lub silanetetrol (podstawnikowa)
2. B(OMe)<sub>3</sub> - trimetoksidobor lub  
tris(metanolano)bor (obie addytywne),  
lub trimetoksyboran (podstawnikowa)

3. FClO lub [ClFO] - fluoridooksidochlor (addytywna),  
lub fluoro- $\lambda^3$ -chloran (podstawnikowa)
4. ClOCl lub [OCl<sub>2</sub>] - dichloridotlen (addytywna),  
lub dichlorooksydan (podstawnikowa)
5. [Ga{OS(O)Me}<sub>3</sub>] - tris(metanosulfinano)gal (addytywna),  
lub tris(metanosulfinyloksy)galan (podstawnikowa)
6. MeP(H)SiH<sub>3</sub> lub  
[SiH<sub>3</sub>{P(H)Me}] - trihydrido(metylofosfanido)krzem (addytywna),  
lub metylo(sililo)fosfan (podstawnikowa)
7. NH<sup>2•</sup> - hydridoazot(2•) (addytywna),  
lub azanyliden (podstawnikowa)
8. HOC(O)• - hydroksidooksidowęgiel(•) (addytywna),  
lub hydroksyoksometylo (podstawnikowa)
9. FArH lub [ArFH] - fluoridohydridoargon
10. [HgMePh] - metylo(fenylo)rtęć (addytywna)
11. [Hg(CHCl<sub>2</sub>)Ph] - (dichlorometylo)(fenylo)rtęć
12. [Te(C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>)Me(NCO)<sub>2</sub>]



bis(cyjaniano-N)(cyklopentylo)(metylo)tellur (addytywna)  
lub cyklopentylo-diizoocyjaniano(metylo)- $\lambda^4$ -tellan (podstawnikowa)

13. [Al(POCl<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+</sup> - heksakis(trichloridooksydofosforo)glin(3+)
14. [Al(OH<sub>2</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+</sup> - heksaakwaglin(3+)
15. [H(py)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> - bis(pirydyna)wodór(1+)
16. [H(OH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> - diakwawodór(1+)
17. [BH<sub>2</sub>(py)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> - dihydridobis(pirydyna)bor(1+)
18. [PFO<sub>3</sub>]<sup>2-</sup> - fluoridotrioksydofosforan(2-)

19.  $[\text{Sb}(\text{OH})_6]^-$  - heksahydroksidoantymonan(1-) (addytywna),  
lub heksahydrokso- $\lambda^5$ -stybanuid (podstawnikowa)  
Końcówka "uid" w nazwach jak "stybanuid" czy "boranuid" jest charakterystyczna dla nomenklatury podstawnikowej i oznacza anion (jon ujemny).
20.  $[\text{HF}_2]^-$  - difluoridowodoran(1-)
21.  $[\text{BH}_2\text{Cl}_2]^-$  - dichloridodihydridoboran(1-) (addytywna),  
lub dichloroboranuid (podstawnikowa)
22.  $\text{OCO}\bullet^-$  - dioksydokarbon( $\bullet$ 1-)
23.  $\text{NO}(2\bullet)^-$  - oksydonitrat( $2\bullet$ 1-)
24.  $\text{PO}_3\bullet^{2-}$  - trioksydofosforan( $\bullet$ 2-)
25.  $[\text{ICl}_2]^+$  - dichloridojod(1+) (addytywna),  
lub dichlorojodanium (podstawnikowa)
26.  $[\text{BH}_4]^-$  - tetrahydridoboran(1-) (addytywna),  
lub boranuid (podstawnikowa)
27.  $\text{CH}_5^-$  - pentahydridokarbon(1-) (addytywna),  
lub metanuid (podstawnikowa)
28.  $[\text{PH}_6]^-$  - heksahydridofosforan(1-) (addytywna),  
lub  $\lambda^5$ -fosfanuid (podstawnikowa)
29.  $[\text{PF}_6]^-$  - heksafluoridofosforan(1-) (addytywna),  
lub heksafluoro- $\lambda^5$ -fosfanuid (podstawnikowa)

### IR-7.3 ZWIĄZKI POLIJĄDROWE

#### IR-7.3.1 Symetryczne związki dijądrowe

W symetrycznych związkach dijądrowych (dwujądrowych) każdy z atomów centralnych jest tym samym pierwiastkiem i są one identycznie związane z ligandami. Poniżej podano nazwy addytywne w kilku formatach dla szeregu takich indywidualów. W niektórych przypadkach możliwe jest również łatwe utworzenie nazw podstawnikowych, co pokazano w przykładach.

Ogólna procedura nazywania symetrycznego związku dijądrowego jest następująca:

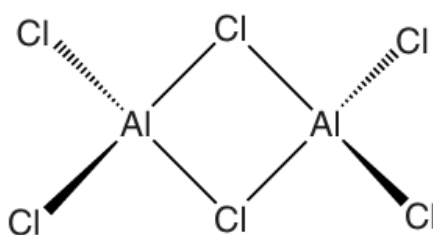
Ligandy przedstawia się w zwykły sposób, a przedrostek zwielokrotniający 'di' dodaje się bezpośrednio przed nazwą atomu centralnego. Nazwę pierwiastka centralnego modyfikuje się do formy 'an', jeśli związek jest anionem.

Wiązanie między dwoma atomami centralnymi, jeśli występuje, zaznacza się, dodając do nazwy pochylone symbole tych dwóch atomów, oddzielone myślnikiem 'em' i ujęte w nawiasy.

W mostkujących związkach dwujądrowych ligandy mostkujące oznacza się grecką literą  $\mu$ , umieszczoną przed nazwą ligandu i oddzieloną od niej łącznikiem. Cały termin, np. ' $\mu$ -chlorido', oddziela się od reszty nazwy łącznikami. Jeśli ligand mostkujący występuje więcej niż raz, stosuje się przedrostki zwielokrotniające (patrz także Sekcje IR-9.1.2.10 i IR-9.2.5.2).

1.  $[\text{Et}_3\text{PbPbEt}_3]$  - heksaetylodiołów(Pb—Pb) (addytywna),

- lub heksaetylo diplumban (podstawnikowa)
2. HSSH•<sup>-</sup> - dihydridodisiarczan(S—S)(•1-) (addytywna),  
lub disulfanidyl (podstawnikowa)
3. NCCN - dinitridowęgiel(C—C)
4. NCCN•<sup>-</sup> - dinitridowęglian(C—C)(•1-)
5. (NC)SS(CN) - bis(nitrydokarbonato)disiarka(S—S),  
lub dicyjanidodisiarka(S—S)
6. (NC)SS(CN)•<sup>-</sup> - bis(nitrydokarbonato)disiarczan(S—S)(•1-),  
lub dicyjanidodisiarczan(S—S)(•1-)
7. OClO - μ-chlorido-ditlen,  
lub dioksydchlor
- 8.



$\text{Al}_2\text{Cl}_4(\mu\text{-Cl})_2$   
di-μ-chlorido-tetrachloridoglin

Wariant formatu w powyższych nazwach addytywnych polega na rozpoczęciu od przedrostka 'bis', a następnie podaniu nazwy połowy cząsteczki lub jonu w nawiasach. Zatem przykłady 1-6 i 8 stają się:

Przykłady:

- |  |   |
|--|---|
| 9. $[\text{Et}_3\text{PbPbEt}_3]$                          | bis(trietylołów)(Pb—Pb)                   |
| 10. HSSH• <sup>-</sup>                                     | bis(hydridosiarczan)(S—S)(•1-)            |
| 11. NCCN   | bis(nitrydowęgiel)(C—C)                   |
| 12. NCCN• <sup>-</sup>                                     | bis(nitrydowęglian)(C—C)(•1-)             |
| 13. (NC)SS(CN)   | bis(nitrydokarbonato)disiarka(S—S)        |
| 14. (NC)SS(CN)• <sup>-</sup>                               | bis(nitrydokarbonato)disiarczan(S—S)(•1-) |
| 15. $\text{Al}_2\text{Cl}_4(\mu\text{-Cl})_2\text{AlCl}_2$ | bis[dichlorido(μ-chlorido)glin]           |

Należy zauważyć, że pięć związków z Przykładów 10-14 może być również łatwo nazwanych jako związki łańcuchowe, co pokazano w Sekcji IR-7.4. Nazwa w Przykładzie 14 różni się od tej podanej w pozycji bibliograficznej 1 (w której wiązanie siarka-siarka było oznaczone jak powyżej, ale atomy węgla były traktowane jako atomy centralne).

Indywiduala w Przykładach 13 i 14 mogą być również traktowane jako zawierające ligand mostkujący, co pokazano w Przykładach 16 i 17.

Przykłady:

- |                     |  |
|---------------------|--|
| $[\text{NCSSCN}]$   | - μ-disulfanedido-bis(nitrydowęgiel)       |
| $[\text{NCSSCN}]•-$ | - μ-disulfanedido-bis(nitrydowęglian)(•1-) |

### IR-7.3.2 Związki dijadrowe niesymetryczne



Istnieją dwa typy niesymetrycznych związków dwujądrowych: (i) te z identycznymi atomami centralnymi, ale różnie podstawionymi ligandami, oraz (ii) te z różnymi atomami centralnymi. W obu przypadkach nazwy tworzy się według procedury opisanej w Sekcji IR-9.2.5, która dotyczy również grup mostkujących.

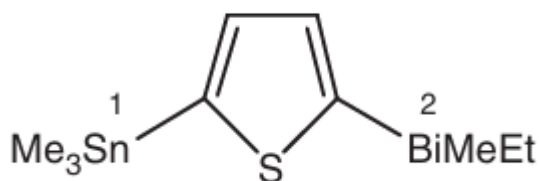
Priorytet przypisuje się atomom centralnym w następujący sposób. Dla przypadków typu (i) atom centralny posiadający większą liczbę ligandów preferowanych alfabetycznie otrzymuje numer 1. Dla przypadków typu (ii) numer 1 przypisuje się pierwiastkowi centralnemu o wyższym priorytecie z Tabeli VI, niezależnie od rozkładu ligandów.

W obu typach związków nazwy konstruuje się w zwykły sposób, najpierw wymieniając przedrostki reprezentujące ligandy w porządku alfabetycznym. Każdy przedrostek reprezentujący ligand jest poprzedzony łącznikiem, numerem(ami) przypisanym(i) do atomu(ów) centralnego(ych), do którego(ych) ligand jest przyłączony (patrz poniżej), grecką literą  $\kappa$  (kappa) (patrz Sekcja IR-9.2.4.2) z prawym indeksem górnym oznaczającym liczbę takich ligandów związanych z atomem(ami) centralnym(i) (liczba 1 jest pomijana dla pojedynczego ligandu), oraz pochylonym symbolem pierwiastka dla atomu wiążącego, przez który ligand jest przyłączony do atomu(ów) centralnego(ych). Opisuje to ligandy i ich sposób przyłączenia. Konstrukcję  $\kappa$  można pominąć w bardzo prostych przypadkach (patrz Przykłady 1-3 poniżej) lub gdy rozkład ligandów na atomach centralnych jest oczywisty (patrz Przykład 4 poniżej).

Nazwy atomów centralnych wymienia się po nazwach ligandów. Przedrostek zwielokrotniający 'di' stosuje się, gdy atomy centralne są tym samym pierwiastkiem. W przeciwnym razie kolejność nazw atomów centralnych uzyskuje się, korzystając z Tabeli VI. Kolejność nazw atomów centralnych odzwierciedla się w numeracji stosowanej z symbolami  $\kappa$ . Końcówkę 'an' dodaje się, jeśli związek dwujądrowy jest anionem, a kropkę rodnicową można dodać dla rodników. W przypadku dwóch różnych atomów centralnych obie nazwy umieszcza się w nawiasach, a końcówkę 'an' dodaje się na zewnątrz nawiasów.

Przykłady:

1. ClClO                      oksydo-1 $\kappa$ O-dichlor(Cl—Cl),  
lub oksydodichlor(Cl—Cl)
2. ClOO•                      chlorido-1 $\kappa$ Cl-ditlen(O—O)(•),  
lub chloridoditlen(O—O)(•)
3. ClClF<sup>+</sup>                      fluorida-1 $\kappa$ F-dichlor(Cl—Cl)(1+),  
lub fluoridodichlor(Cl—Cl)(1+)
4. [O<sub>3</sub>POSO<sub>3</sub>]<sup>2-</sup>               $\mu$ -oksydo-heksaoksydo-1 $\kappa^3$ O,2 $\kappa^3$ O-(fosforosiarczan)(2-),  
lub  $\mu$ -oksydo-heksaoksydo(fosforosiarczan)(2-)
- 5.

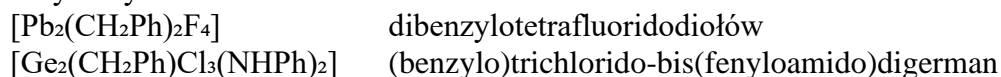


etylo-2 $\kappa$ C-tetrametylo-1 $\kappa^3$ C,2 $\kappa$ C- $\mu$ -tiofeno-2,5-dylo-cynobizmut

6.  $[\text{Cl}(\text{PhNH}_2)\text{GeGeCl}_3]$  tetrachlorido-1 $\kappa^3\text{Cl}$ ,2 $\kappa\text{Cl}$ -bis(fenyloamido-2 $\kappa\text{N}$ )-digerman(Ge—Ge)  
 7.  $\text{LiPbPh}_3$  - trifenylo-2 $\kappa^3\text{C}$ -litołów(Li—Pb)

W przypadkach, gdy dokładne pozycje ligacji nie są znane, nie można stosować konwencji kappa.

Przykłady:



### IR-7.3.3 Związki oligojądrowe

W prostych przypadkach zasady z poprzednich sekcji można uogólnić na nazewnictwo związków oligojądrowych. Tu również występują związki, które można łatwo nazwać przy użyciu nomenklatury podstawnikowej ze względu na dostępność oczywistych wodorków macierzystych.

Przykłady:

1.  $\text{HO}_3\bullet$  hydridotritlen( $\bullet$ )
2.  $\text{HON}_3\bullet^-$  hydroksydo-1 $\kappa\text{O}$ -trinitrydo(2 N—N)( $\bullet$ 1-)
3.  $\text{Cl}_3\text{SiSiCl}_2\text{SiCl}_3$  oktachloridotrikrzem(2 Si—Si) (addytywna),

lub oktachlorotrisilan (podstawnikowa)

4.  $\text{FMe}_2\text{SiSiMe}_2\text{SiMe}_3$  fluorido-1 $\kappa\text{F}$ -heptametylotrikrzem(2 Si—Si) (addytywna),

lub 1-fluoro-1,1,2,2,3,3,3-heptametyltrisilan (podstawnikowa)

(Alternatywną nazwą addytywną dla związku z Przykładu 3, opartą na najdłuższym łańcuchu w cząsteczce, można również skonstruować metodą opisaną w Sekcji IR-7.4.3; patrz Przykład 6 tamże.)

W przypadku układów heterooligojądrowych potrzebne są dodatkowe konwencje do identyfikacji i nazywania zbioru atomów centralnych oraz do numerowania atomów centralnych w celu zapewnienia lokantów dla ligandów.

Przykład:

5.  $\text{Me}_3\text{SiSeSiMe}_3$

$\mu$ -selenido-bis(trimetylosilikon) (addytywna), lub

heksametylo-1 $\kappa^3\text{C}$ ,2 $\kappa^3\text{C}$ -disilikon-selenium(2 Si—Se) (addytywna), lub

1,1,1,3,3,3-heksametylodisilaselanan (podstawnikowa)

Należy zauważyć, że w ostatnim przykładzie można wybrać nazwanie związku jako dwujądrowego lub trójjądrowego. Złożoności wynikające z wariantów strukturalnych, które mogą wystąpić w przypadku homojądrowych i heterojądrowych skupisk atomów centralnych oraz grup mostkujących, są omówione bardziej szczegółowo w Sekcjach IR-9.2.5.6 do IR-9.2.5.7.

## IR-7.4 ŁAŃCUCHY I PIERŚCIENIE NIEORGANICZNE

### IR-7.4.1 Informacje ogólne

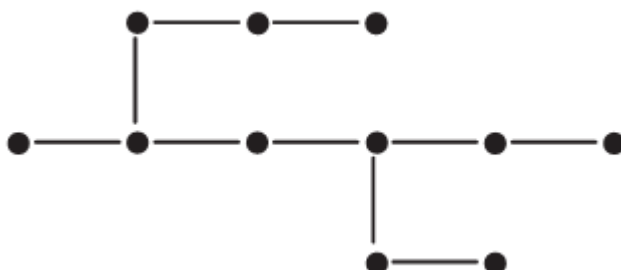
Struktury łańcuchowe i pierścieniowe nieorganiczne można nazywać bez implikacji dotyczących charakteru wiązań, z wyjątkiem połączeń w cząsteczce lub jonie, używając szczególnego systemu nomenklatury addytywnej. Metodę tę można stosować do wszystkich związków łańcuchowych i pierścieniowych, chociaż jest ona głównie przeznaczona dla indywidualów składających się głównie z atomów innych niż węgiel. Podczas gdy małe cząsteczki można wygodniej nazywać używając kilku alternatywnych metod, zaletą tego

systemu nomenklatury jest prostota, z jaką skomplikowane struktury można wyprowadzić z nazwy i odwrotnie (vice versa). Szczegóły tego systemu podano w pozycji 2; tutaj przedstawiono uproszczone ujęcie.

Ogólną topologię struktury określa się następująco. Neutralny związek łańcuchowy nazywa się "katena", poprzedzony przedrostkiem zwielokrotniającym "di", "tri" itd., wskazującym liczbę rozgałęzień w cząsteczce. Analogicznie związki cykliczne nazywa się "cykle" poprzedzonym odpowiednim przedrostkiem zwielokrotniającym. Mieszany związek łańcuchowo-pierścieniowy klasyfikuje się jako zespół (assembly) złożony z modułów acyklicznych i cyklicznych i, jeśli jest neutralny, nazywa się go "katenacykle", z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi wstawionymi jak w Przykładzie 3 poniżej.

Przykłady:

1.



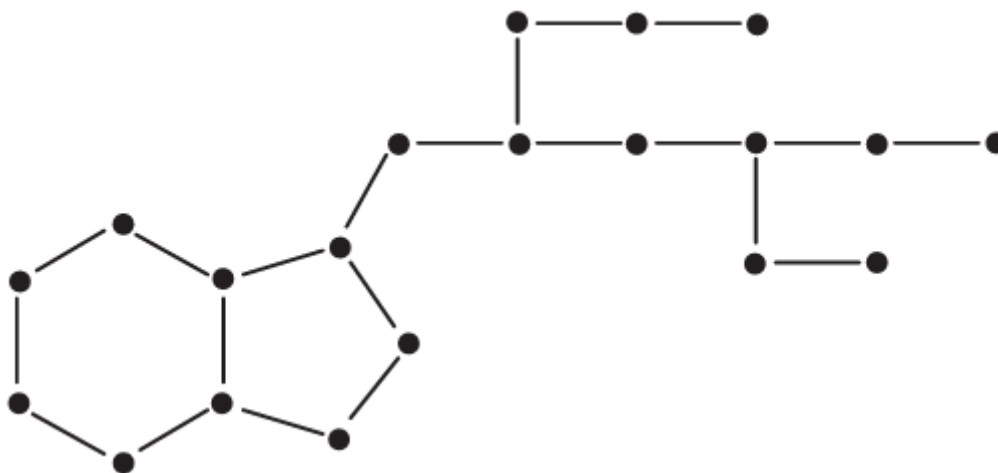
trikatena

2.



dicykl

3.



trikatenadicykl

### IR-7.4.2 Deskryptor węzłowy

Połączenia w szkielecie cząsteczkowym są oznaczane przez deskryptor węzłowy, który umieszcza się w nawiasach kwadratowych bezpośrednio przed terminami 'katena', 'cykl' lub 'katenacykl'. Atomy są numerowane zgodnie z ogólną nomenklaturą węzłową, niezależnie od ich tożsamości. Tylko w przypadku niejednoznaczności bierze się pod uwagę tożsamość atomów.

Pierwsza część deskryptora wskazuje liczbę atomów w głównym łańcuchu. Cyfry arabskie po kropce wskazują długości rozgałęzień cytowanych w kolejności pierwszeństwa. Lokant w indeksie górnym dla każdego rozgałęzienia oznacza atom w już ponumerowanej części cząsteczki, do którego przyłączone jest rozgałęzienie.

Zero w deskrytorze oznacza pierścień i jest po nim podana liczba arabska wskazująca liczbę atomów w głównym pierścieniu. Dla układów policyklicznych numerowanie rozpoczyna się od jednego z atomów mostkowych i przebiega w kierunku dającym najniższy możliwy lokant dla drugiego atomu mostkowego. W tym przypadku, liczba atomów w mostku jest podawana po kropce. Para lokantów w indeksie górnym jest wstawiana dla każdej takiej liczby mostka, oddzielona przecinkiem i cytowana w rosnącym porządku numerycznym.

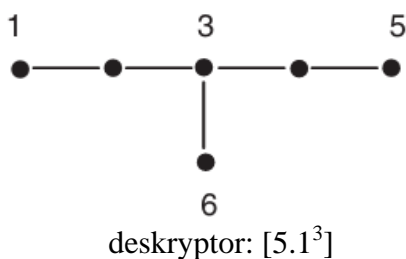
Deskryptor zespołu składa się z nawiasów kwadratowych zawierających, w kolejności ich starszeństwa (patrz pozycja 2 dla zasad), deskryptory węzłowe każdego modułu w nawiasach. Między deskryptorami modułów wskazane są lokanty węzłów łączących moduły. Te lokanty, oddzielone dwukropkiem, są numerami atomów w ostatecznym numerowaniu całego zespołu (porównaj Przykład 7 poniżej z Przykładami 5 i 6).

Przykłady:

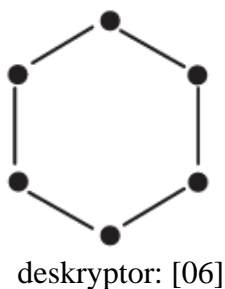
1.



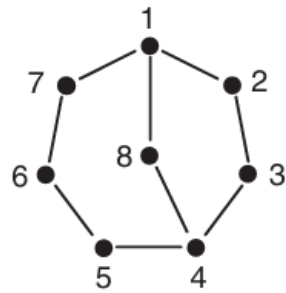
2.



3.

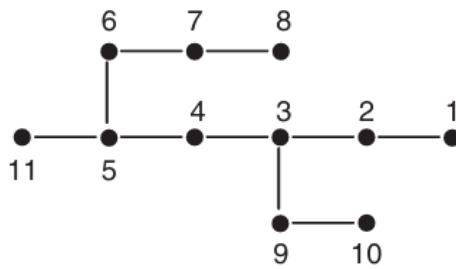


4.



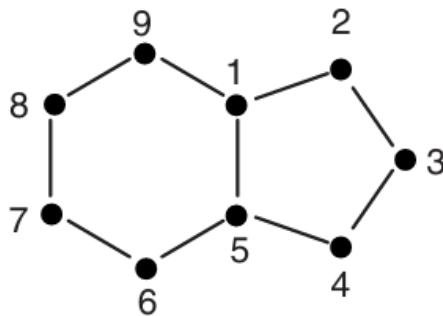
deskryptor: [07.1<sup>1,4</sup>]

5.



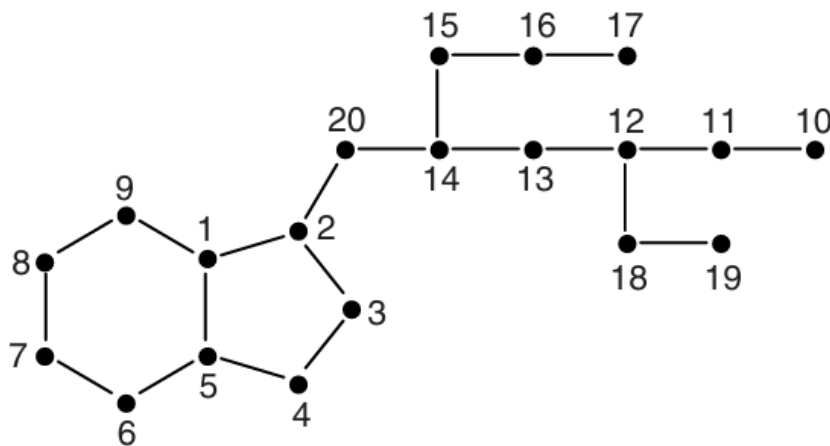
deskryptor: [8.2<sup>3</sup>1<sup>5</sup>]

6.



deskryptor: [09.0<sup>1,5</sup>]

7.



deskryptor: [(09.0<sup>1,5</sup>) 2:20(8.2<sup>3</sup>1<sup>5</sup>)]

### IR-7.4.3 Konstruowanie nazw

Atomy tworzące szkielet węzłowy są wymieniane w porządku alfabetycznym wraz z ich lokantami i są nazywane przy użyciu terminów 'y', których przykłady podano w Tabeli IR-7.1; pełna lista znajduje się w Tabeli X.

Tabela IR-7.1 Niektóre terminy 'y' do nazywania pierwiastków w szkielecie węzłowym

H hydrony	C karby	N azy	O oksy
B bory	Si sily	P fosfy	S sulfy
	Ge germy	As arsy	Se seleny
	Sn stany	Sb styby	Te telury

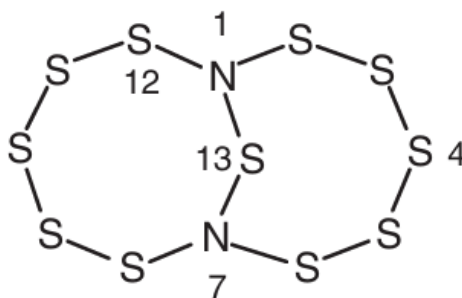
Atomy i grupy atomów, które nie są częścią szkieletu węzłowego, nazywa się jako ligandy (Sekcja IR-7.1.3) i wymienia w porządku alfabetycznym wraz z ich lokantami przed sekwencją nazw atomów tworzących szkielet węzłowy. Następnie podaje się deskryptor węzłowy. Na końcu dodaje się termin 'katena', 'cykl' lub 'katenacykl', por. Sekcja IR-7.4.1. (Należy zauważyć, że w tym systemie nie stosuje się ligandów mostkujących.)

W przypadku anionów i kationów, terminy te modyfikuje się odpowiednio końcówkami 'an' i 'ium', dając terminy 'katenan', 'katenium', 'cyklan', 'cyklium', 'katenadycylium', 'katenacyklan' itd., a na końcu nazwy dodaje się numer ładunku. Indywidua rodnikowe można oznaczać analogicznie używając kropki rodnikowej (patrz Sekcja IR-7.1.4).

Przykłady 1-6, które pokazują zastosowanie opisanego tu systemu, zostały również nazwane w Sekcji IR-7.3.1. Przykładów 7-13 nie można tak łatwo nazwać innymi metodami.

Przykłady:

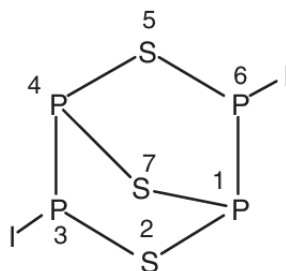
1. NCCN - 1,4-diazy-2,3-dikarby-katena
2. NCCN<sup>•-</sup> - 1,4-diazy-2,3-dikarby-katenan(•1-)
3. NCSSCN - 1,6-diazy-2,5-dikarby-3,4-disulfy-katena
4. NCSSCN<sup>•-</sup> - 1,6-diazy-2,5-dikarby-3,4-disulfy-katenan(•1-)
5. HSSH<sup>•-</sup> - 1,2-dihydrydo-1,2-disulfy-2-katenan(•1-)
6. Cl<sub>3</sub>SiSiCl<sub>2</sub>SiCl<sub>3</sub> - 2,2,3,3,4,4-heksachlorido-1,5-dichlory-2,3,4-trisily-katena
7. ClSiH<sub>2</sub>SiH(Me)NSO - 2,2,3-trihydrydo-3-metylo-4-azy-1-chlory-6-oksy-2,3-disily-5-sulfy-katena
- 8.



1,7-diazyundekasyne-[012.1<sup>1</sup>,7]dicykl

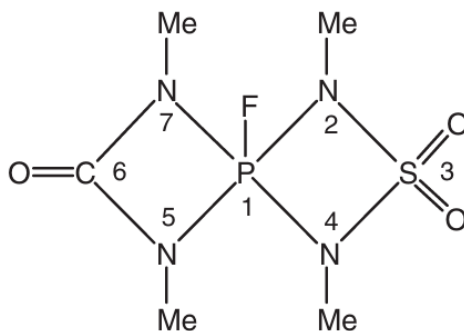
Ponieważ ten związek zawiera tylko azot i siarkę, nie jest konieczne wskazywanie położenia (lokantów) wszystkich atomów siarki. Wymagane jest jedynie określenie położenia dwóch atomów azotu. Ta sama zasada ma zastosowanie do kilku następujących przykładów.

- 9.



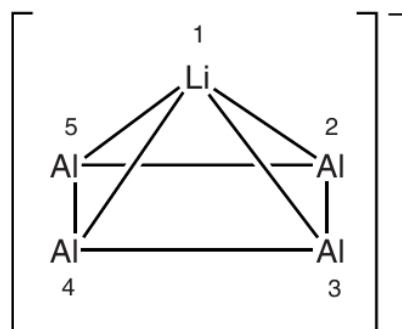
3,6-diiodido-1,3,4,6-tetrafosfino-2,5,7-trisulfo-[06.1<sup>1,4</sup>]dicyk

10.



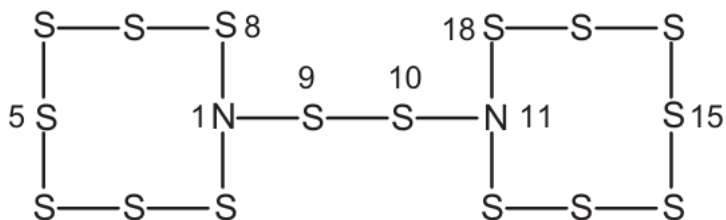
1-fluorido-2,4,5,7-tetrametylo-3,3,6-trioksido-2,4,5,7-tetraaza-6-karbo-1-fosfino-3-sulfo-[04.3<sup>1,1</sup>]dicyk

11.



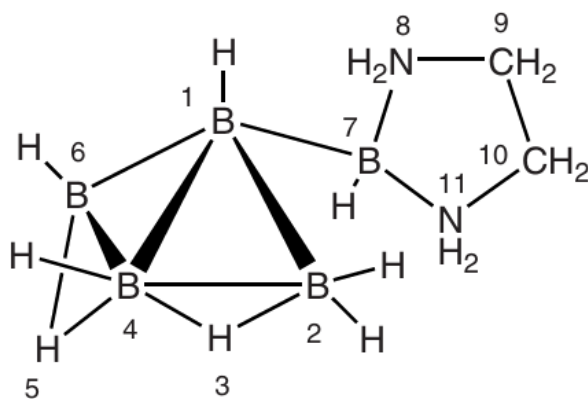
tetraaluminio-1-litio-[05.0<sup>1.30<sup>1.40<sup>2.5</sup></sup></sup>]tetracyk(1-)

12.



1,11-diazaheksadekasulfo-[(08)1:9(2)10:11(08)]katadicyk

13.



1,2,2,4,6,7,8,8,9,9,10,10,11,11-tetradecahydrido-8,11-diaza-1,2,4,6,7-pentaboro-9,10-dikarbo-3,5-dihydroksy-[(06.0<sup>1</sup>.40<sup>2</sup>.40<sup>4</sup>.6)1:7(05)]pentacyk

### BIBLIOGRAFIA

1. Names for Inorganic Radicals, W.H. Koppenol, Pure Appl. Chem., 72, 437-446 (2000).
2. Nomenclature of Inorganic Chains and Ring Compounds, E.O. Fluck and R.S. Laitinen, Pure Appl. Chem., 69, 1659-1692 (1997); Chapter II-5 in Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001



## **IR-8 Kwasy nieorganiczne i ich pochodne**

### **Spis treści**

#### **IR-8.1 Wprowadzenie i przegląd zagadnień**

#### **IR-8.2 Ogólne zasady systematycznego nazewnictwa kwasów**

#### **IR-8.3 Nomenklatura addytywna**

#### **IR-8.4 Nomenklatura wodorowa**

#### **IR-8.5 Uproszczone nazwy anionów zawierających wodór**

#### **IR-8.6 Nomenklatura wymienna dla pochodnych kwasów tlenowych**

#### **IR-8.7 Odnosiniki literaturowe**

### **IR-8-1 Wprowadzenie i przegląd zagadnień**

IR-8.1 Wprowadzenie i przegląd zagadnień Wiele związków nieorganicznych oraz prostych związków zawierających węgiel często określa się nazwami niesystematycznymi lub półsystematycznymi zawierającymi słowo "kwas". Przykładami są: kwas borowy (ortoborowy), kwas metaborowy, kwas fosforowy, kwas difosforowy, kwas cyklotrifosforowy, kwas katena-trifosforowy, kwas ditionawy czy kwas nadtlendiosiarkowy. Nazwy te zajmują szczególne miejsce we współczesnym nazewnictwie, ponieważ w dosłownej interpretacji opisują określoną właściwość chemiczną danego związku, podczas gdy nazewnictwo systematyczne opiera się wyłącznie na składzie i strukturze związku.

Wszystkim tym kwasom można nadać nazwy systematyczne oparte na strukturze, stosując zasady nazewnictwa addytywnego i podstawnikowego opisane we wcześniejszych rozdziałach. Z tego punktu widzenia nazwy zawierające słowo "kwas" są zbędne. Co więcej, wiele substancji wykazujących właściwości kwasowe nie jest nazywanych kwasami - dotyczy to na przykład jonów akwakompleksowych, takich jak heksaakwaglin(3+), wodoroków i ich pochodnych, jak jon amonowy czy siarkowodór (sulfan). Wskazuje to na niekonsekwentne stosowanie terminu "kwas".

W świetle powyższych rozważań nie zaleca się używania słowa "kwas" w nowych nazwach związków nieorganicznych. Jednak niektóre nazwy zawierające to słowo (np. kwas siarkowy, kwas nadchlorowy) są tak powszechnie stosowane, że ich całkowite zastąpienie nazwami systematycznymi byłoby niepraktyczne. Dodatkowo, nazwy te służą jako podstawa do tworzenia nazw pochodnych organicznych, które bezpośrednio lub pośrednio wywodzą się od nazw zawierających słowo "kwas". Odpowiednie przykłady przedstawiono poniżej oraz w podrozdziale IR-8.6. Rozdział ten ma następujące cele:

- przedstawienie sposobu tworzenia nazw systematycznych dla związków nieorganicznych powszechnie znanych pod nazwami zwyczajowymi, z wykorzystaniem nazewnictwa addytywnego (podrozdział IR-8.3 oraz Tabele IR-8.1 i IR-8.2)
- wskazanie nazw kwasów zawierających słowo "kwas", które pozostają dopuszczalne ze względu na ich powszechne stosowanie lub wykorzystanie w nazewnictwie związków organicznych (Tabele IR-8.1 i IR-8.2)

Podrozdziały IR-8.4 i IR-8.5 przedstawiają alternatywny system tworzenia nazw, bazujący na obecności wodoru w związku, nazwany *nomenklaturą wodorową*. Nazwy tworzone w tym systemie można traktować jako rozszerzenie powszechnie stosowanych określeń dla anionów, takich jak "wodorowęglany". Należy jednak zaznaczyć, że nie są one niezbędne do

jednoznacznego określenia struktur cząsteczkowych i mogą być rozpatrywane jako oddzielne zagadnienie nomenklaturowe.

Rozdział przedstawia zatem kilka dopuszczalnych wariantów nazewnictwa kwasów nieorganicznych, pozostawiając wybór najbardziej odpowiedniej nazwy użytkownikowi. W przyszłości IUPAC planuje określić preferowane nazwy dla związków nieorganicznych odnoszących się do omawianych kwasów, podobnie jak uczyniono to dla związków organicznych.

Nazwy, które nie pozwalają na jednoznaczne określenie składu związku (np. kwas chlorowodorowy, kwas cynowy, kwas wolframowy), wykraczają poza zakres przedstawionego nazewnictwa systematycznego. Dla tych substancji należy stosować nazwy systematyczne, takie jak chlorek wodoru, tlenek cyny(IV), tlenek wolframu(VI).

W przykładach zamieszczonych w tym rozdziale podano alternatywne zapisy wzorów, aby podkreślić ich związek z omawianym nazewnictwem addytywnym. Wzory te opierają się na traktowaniu struktury związku jako uogólnionego układu koordynacyjnego. W przypadku układów jednojądrowych oznacza to, że symbol atomu centralnego umieszcza się jako pierwszy, a następnie, w porządku alfabetycznym, symbole ligandów, zgodnie z zasadami przedstawionymi w podrozdziale IR-4.4.3.2.

Przykład:

1. kwas fosforowy =  $\text{H}_3\text{PO}_4$  lub  $[\text{PO}(\text{OH})_3]$

Związek ten można nazwać na dwa sposoby, uwzględniając jego strukturę:

- według nazewnictwa podstawnikowego (Rozdział IR-6), traktując go jako pochodną wodoru macierzystego  $\lambda^5$ -fosfanu ( $\text{PH}_5$ ), co daje nazwę trihydroksy- $\lambda^5$ -fosfanon
- według nazewnictwa addytywnego (Rozdział IR-7) jako trihydroksydooksydofosfor

Nazwa "kwas fosforowy", choć nie odzwierciedla struktury związku, jest zgodna z ogólną zasadą, gdzie końcówka "-owy" wskazuje na wyższy lub najwyższy możliwy stopień utlenienia (podobnie jak w przypadku kwasu azotowego czy kwasu siarkowego). Przykłady 2 i 3 ilustrują nazewnictwo pochodnych organicznych utworzonych od kwasu fosforowego jako związku macierzystego.

Przykłady:

2.  $\text{PO}(\text{OMe})_3$  fosforan trimetylu

3.  $\text{PO}(\text{NMe}_2)_3$  triamid heksametylofosforowy

Dla obu tych związków można utworzyć nazwy stosując nazewnictwo podstawnikowe (bazując na wspomnianym wodoru macierzystym) lub nazewnictwo addytywne. Jednak przedstawione powyżej nazwy są preferowanymi nazwami IUPAC (patrz Sekcja P-67.1 pozycji 1).

Niektóre nazwy pewnych organicznych pochodnych kwasów nieorganicznych wciąż zawierają słowo „kwas”, tak jak ma to miejsce w przypadku następujących pochodnych kwasu arsonowego ( $\text{H}_2\text{AsHO}_3$  lub  $[\text{AsHO}(\text{OH})_2]$ ).

Przykłady:

4.  $\text{PhAsO}(\text{OH})_2$  kwas fenyloarsonowy
5.  $\text{EtAsCl}(\text{OH})\text{S}$  O-kwas etyloarsonochloridationowy

W przykładzie 4 związek traktowany jest jako pochodna kwasu arsonowego, powstała przez podstawienie atomu wodoru związanego bezpośrednio z arsenem grupą fenylową. Nazwa w przykładzie 5 uwzględnia nie tylko podstawienie wodoru, ale również wykorzystuje nazewnictwo wymienne (Rozdział IR-8.6).

Warto zauważyć, że istnieje jeden ogólny przypadek, gdy słowo "kwas" może pojawić się w pełni systematycznej nazwie związku nieorganicznego - ma to miejsce wtedy, gdy stosuje się nazewnictwo podstawnikowe i przyrostek dla grupy podstawnikowej o najwyższym pierwszeństwie kończy się słowem "kwas".

Rozważmy kwasy politionowe  $\text{H}_2\text{S}_n\text{O}_6 = [(\text{HO})(\text{O})_2\text{SS}_{n-2}\text{S}(\text{O})_2(\text{OH})]$  ( $n \geq 2$ ), znane pod zwyczajowymi nazwami jako kwas ditionowy, tritionowy, tetracionowy itd. Można je nazwać systematycznie używając nazewnictwa addytywnego, jak pokazano w Tabeli IR-8.1. Dla  $n \geq 3$  można je również nazwać stosując nomenklaturę podstawnikową, bazując na centralnym szkielecie (poli)sulfanowym, co ilustrują poniższe przykłady:

6.  $\text{H}_2\text{S}_3\text{O}_6 = [(\text{HO})(\text{O})_2\text{SSS}(\text{O})_2(\text{OH})]$  kwas sulfanodisulfonowy
7.  $\text{H}_2\text{S}_4\text{O}_6 = [(\text{HO})(\text{O})_2\text{SSSS}(\text{O})_2(\text{OH})]$  kwas disulfanodisulfonowy

## IR-8.2 Ogólne zasady systematycznego nazewnictwa kwasów

Przy tworzeniu nazw systematycznych, związki cząsteczkowe i jony tradycyjnie klasyfikowane jako kwasy nieorganiczne traktuje się według tych samych zasad co pozostałe indywidua chemiczne.

Najprostszą do zastosowania ogólną zasadą nazewnictwa systematycznego jest nazewnictwo addytywne, które przedstawiono w Rozdziale IR-8.3. Jak wspomniano w Rozdziale IR-8.1, można również stosować nazewnictwo podstawnikowe, jednak nie będzie ono tutaj szerzej omawiane.

Rozdziały IR-8.4 i IR-8.5 opisują nomenklaturę wodorową, która jest powiązana z nazwami addytywnymi i potrzebną tylko w szczególnych przypadkach.

Metoda nazywana "nomenklaturą kwasową" opisana w Rozdziale I-9.6 pozycji literaturowej 2 jest rzadko stosowana i zbędna. W związku z tym nie zaleca się już jej stosowania.

**Tabela IR-8.1.** Akceptowane nazwy zwyczajowe oraz systematyczne (addytywne) dla kwasów tlenowych i związków pochodnych

Tabela obejmuje związki zawierające tlen i wodór oraz co najmniej jeden inny pierwiastek i przynajmniej jedną grupę OH, a także niektóre izomery oraz przykłady odpowiadających im form częściowo i całkowicie odwodornionych. Wzory podano w klasycznym formacie zapisu kwasów tlenowych, gdzie najpierw wymienione są wodory "kwasowe" (związane z tlenem), następnie atom(y) centralny(e), dalej atomy wodoru związane bezpośrednio z atomem centralnym, a na końcu atomy tlenu (np.  $\text{HBH}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{P}_2\text{H}_2\text{O}_5$ ). Wyjątek stanowią związki łańcuchowe, jak np.  $\text{HOCN}$ . W większości przypadków wzory zapisano również w formie stosowanej dla związków koordynacyjnych, zgodnie z zasadami przedstawionymi w Rozdziale IR-7 (np. w Tabeli podano ' $\text{HBH}_2\text{O} = [\text{BH}_2(\text{OH})]'$ ' i ' $\text{H}_2\text{SO}_4 = [\text{SO}_2(\text{OH})_2]'$ '). Więcej przykładów nazw kwasów tlenowych podano w Tabeli IX.

Należy zauważyć, że Sekcja P-42 pozycji literaturowej 1 zawiera wiele nieorganicznych form kwasów tlenowych wykorzystywanych jako struktury macierzyste przy tworzeniu nazw pochodnych organicznych (patrz dyskusja w Rozdziale IR-8.1). Większość, choć nie wszystkie z tych form, zostały uwzględnione w niniejszej tabeli. Nie wyszczególniono w sposób jednoznaczny niektórych kwasów di- i polijądrowych.

<i>Wzór</i>	<i>Akceptowana nazwa zwyczajowa (jeżeli nie zaznaczono inaczej)</i>	<i>Systematyczna nazwa addytywna (w niektórych przypadkach podano więcej niż jedną możliwość)</i>
$\text{H}_3\text{BO}_3 = [\text{B}(\text{OH})_3]$	kwas borowy <sup>a</sup>	trihydroksidobor
$\text{H}_2\text{BO}_3^- = [\text{BO}(\text{OH})_2]^-$	diwodoroboran	dihydroksidooksidoboran(1-)
$\text{HBO}_3^{2-} = [\text{BO}_2(\text{OH})]^{2-}$	wodoroboran	hydroksidodioksidoboran(2-)
$[\text{BO}_3]^{3-}$	ortoboran	trioksidoboran(3-)
$(\text{HBO}_2)_n = (-\text{B}(\text{OH})\text{O}-)_n$	kwas metaborowy	katena-poli[hydroksidobor- $\mu$ -oksydo]
$(\text{BO}_2^-)_n = (-\text{OBO}-)_n^{n-}$	metaboran	katena-poli[(oksidoboran- $\mu$ -oksydo)(1-)]
$\text{H}_2\text{BHO}_2 = [\text{BH}(\text{OH})_2]$	kwas boronowy	dihydroksidohydridobor
$\text{HBH}_2\text{O} = [\text{BH}_2(\text{OH})]$	kwas borynowy	dihydridohydroksidobor
$\text{H}_2\text{CO}_3 = [\text{CO}(\text{OH})_2]$	kwas węglowy	dihydroksidooksidowęgiel
$\text{HCO}_3^- = [\text{CO}_2(\text{OH})]^-$	wodorowęglan	hydroksidodioksidowęglan(1-)
$[\text{CO}_3]^{2-}$	węglan	trioksidowęglan(2-)
$\text{HOCN} = [\text{C}(\text{N})\text{OH}]$	kwas cyjanowy	hydroksidonitridowęgiel
$\text{HNCO} = [\text{C}(\text{NH})\text{O}]$	kwas izocyjanowy	azanodiidoksidowęgiel
$\text{OCN}^- = [\text{C}(\text{N})\text{O}]^-$	cyjanian	nitridooksidowęglan(1-)
$\text{HONC} = [\text{N}(\text{C})\text{OH}]$	<sup>b</sup>	dihydroksidokarbidoazot

$\text{HCNO} = [\text{N}(\text{CH})\text{O}]$	b	(hydridowęglano)oksidoazot
$\text{ONC}^- = [\text{N}(\text{C})\text{O}]^-$	b	karbidooksidoazotan(1-)
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = [\text{Si}(\text{OH})_4]$	kwasy ortokrzemowy <sup>a</sup>	tetrahydroksidokrzem
$[\text{SiO}_4]^{4-}$	ortokrzemian	tetraoksidoorzemian(4-)
$(\text{H}_2\text{SiO}_3)_n = (-\text{Si}(\text{OH})_2\text{O}-)_n$	kwasy metakrzemowy	katena-poli[dihydroksidokrzem- $\mu$ -oksido]
$(-\text{SiO}_3^-)_n^{2n-}$	metakrzemian	katena-poli[(dioksidoorzemian- $\mu$ -oksido)(1-)]
$\text{H}_6\text{Si}_2\text{O}_7 = [(\text{HO})_3\text{SiOSi}(\text{OH})_3]$	kwasy dikrzemowy <sup>c</sup>	$\mu$ -oksido-bis(trihydroksidokrzem)
$[\text{Si}_2\text{O}_7]^{6-} = [\text{O}_3\text{SiOSiO}_3]^{6-}$	dikrzemian	$\mu$ -oksido-bis(trioksidoorzemian)(6-)
$\text{H}_2\text{NO}_3^+ = [\text{NO}(\text{OH})_2]^+$	<sup>d</sup>	dihydroksidooksidoazot(1+), diwodoro(trioksidoazotan)(1+)
$\text{HNO}_3 = [\text{NO}_2(\text{OH})]$	kwasy azotowy	hydroksidodioksidoazot
$[\text{NO}_3]^-$	azotan	trioksidoazotan(1-)
$\text{H}_2\text{NHO} = [\text{NH}_2\text{OH}]$	hydroksyloamina <sup>e</sup>	hydroksidodihydridoazot
$\text{H}_2\text{NHO}_3 = [\text{NHO}(\text{OH})_2]$	kwasy azonowy	dihydroksidohydridoazot
$\text{HNO}_2 = [\text{NO}(\text{OH})]$	kwasy azotawy	hydroksidooksidoazot
$[\text{NO}_2]^-$	azotyn	dioksidoazotan(1-)
$\text{HNH}_2\text{O}_2 = [\text{NH}_2\text{O}(\text{OH})]$	kwasy azynowy	hydroksidodihydridoazot
$\text{H}_2\text{N}_2\text{O}_2 = [\text{HON}=\text{NOH}]$	diazenodioli <sup>f</sup>	bis(hydroksidoazot)(N-N), lub 1,4-dihydrido- 2,3-diazy-1,4-dioksy-[4]katena
$\text{HN}_2\text{O}_2^- = [\text{HON}=\text{NO}]^-$	2-hydroksydiazeno-1-ian <sup>f</sup> (ang. 2- hydroxydiazene-1-olate)	hydroksido-1 $\kappa$ O-oksido-2 $\kappa$ O-diazotan(N- N)(1-), lub 1-hydrido-2,3-diazy-1,4-dioksy- [4]katenian(1-)
$[\text{N}_2\text{O}_2]^{2-} = [\text{ON}=\text{NO}]^{2-}$	diazenodiolan <sup>f</sup>	bis(oksidoazotan)(N-N)(2-), lub 2,3-diazy-1,4- dioksy-[4]katenian(2-)
$\text{H}_3\text{PO}_4 = [\text{PO}(\text{OH})_3]$	kwasy fosforowy <sup>a</sup>	trihydroksidooksidofosfor
$\text{H}_2\text{PO}_4^- = [\text{PO}_2(\text{OH})_2]^-$	diwodorofosforan	dihydroksidodioksidoazot(1-)
$\text{HPO}_4^{2-} = [\text{PO}_3(\text{OH})]^{2-}$	wodorofosforan	hydroksidotrioksidoazot(2-)
$[\text{PO}_4]^{3-}$	fosforan	tetraoksidoazot(3-)
$\text{H}_2\text{PHO}_3 = [\text{PHO}(\text{OH})_2]$	kwasy fosfonowy <sup>g</sup>	dihydroksidohydridodioksidoazot
$[\text{PHO}_2(\text{OH})]^-$	wodorofosfonian	hydroksidohydridodioksidoazot(1-)
$[\text{PHO}_3]^{2-}$	fosfonian	hydridotrioksidoazot(2-)

$H_3PO_3 = [P(OH)_3]$	kwas fosforawy	trihydroksidofosfor
$H_2PO_3^- = [PO(OH)_2]^-$	diwodorofosforan	dihydroksidooksidofosforan(1-)
$HPO_3^{2-} = [PO_2(OH)]^{2-}$	wodorofosforyn	hydroksidodioksidofosforan(2-)
$[PO_3]^{3-}$	fosforyn	trioksidofosforan(3-)
$HPO_2 = [P(O)OH]$	hydroksyfosfanon <sup>h</sup>	hydroksidooksidofosfor
$HPO_2 = [P(H)O_2]$	$\lambda^5$ -fosfanodion <sup>h</sup>	hydridodioksidofosfor
$H_2PHO_2 = [PH(OH)_2]$	kwas fosfonawy	dihydroksidohydrodofosfor
$HPH_2O_2 = [PH_2O(OH)]$	kwas fosfinowy	hydroksidodihydrodooksidofosfor
$HPH_2O = [PH_2(OH)]$	kwas fosfinawy	hydroksidodihydridofosfor
$H_4P_2O_7 = [(HO)_2P(O)OP(O)(OH)_2]$	kwas difosforowy	$\mu$ -oksidobis(dihydroksidooksidofosfor)
$(HPO_3)_n = (-P(O)(OH)O-)_n$	kwas metafosforowy	katena-poli[hydroksidooksidofosfor- $\mu$ -oksidobis]
$H_4P_2O_6 = [(HO)_2P(O)P(O)(OH)_2]$	kwas podfosforowy	bis(dihydroksidooksidofosfor)(P-P)
$H_2P_2H_2O_5 = [(HO)P(H)(O)OP(H)(O)(OH)]$	kwas difosfonowy	$\mu$ -oksidobis(hydroksidohydridooksidofosfor)
$P_2H_2O_5^{2-} = [O_2P(H)OP(H)(O)_2]^{2-}$	difosfonian	$\mu$ -oksidobis(hydridodioksidofosforan)(2-)
$H_3P_3O_9$	kwas cyklo-trifosforowy	tri- $\mu$ -oksidotris(hydroksidooksidofosfor), lub 2,4,6-trihydroksido-2,4,6-trioksidobis-1,3,5-trioksy-2,4,6-trifosfy-[6]-cykl(ang. cycle)
$H_5P_3O_{10}$	kwas katena-trifosforowy, kwas trifosforowy <sup>c</sup>	pentahydroksido-1 $\kappa^2$ O,2 $\kappa$ O,3 $\kappa^2$ O-di- $\mu$ -oksidotrioksidobis-1 $\kappa$ O,2 $\kappa$ O,3 $\kappa$ O-trifosfor, lub $\mu$ -(hydroksidotrioskidofosforano-1 $\kappa$ O,2 $\kappa$ O)-bis(dihydroksidooksidofosfor) lub 2,4,6-trihydroksido-1,7-dihydrido-2,4,6-trioksidobis-1,3,5,7-tetraoksy-2,4,6-trifosfy-[7]katena
$H_3AsO_4 = [AsO(OH)_3]$	kwas arsenowy, arsoric acid <sup>i</sup>	trihydroksidooksidoarsen
$H_3AsO_3 = [As(OH)_3]$	arsenous acid, kwas arsenawy <sup>i</sup> ,	trihydroksidoarsen
$H_2AsHO_3 = [AsHO(OH)_2]$	kwas arsonowy	dihydroksidohydridooksidoarsen
$H_2AsHO_2 = [AsH(OH)_2]$	kwas arsonawy	dihydroksidohydridoarsen
$HAsH_2O_2 = [AsH_2O(OH)]$	kwas arsynowy	hydroksidodihydridooksidoarsen
$HAsH_2O = [AsH_2(OH)]$	kwas arsynawy	hydroksidodihydridoarsen
$H_3SbO_4 = [SbO(OH)_3]$	kwas antymonowy <sup>i</sup>	trihydroksidooksidoantymon
$H_3SbO_3 = [Sb(OH)_3]$	kwas antymonawy <sup>i</sup>	trihydroksidoantymon

$H_2SbHO_3 = [SbHO(OH_2)]$	kwasy antymonowe	dihydroksidohydridoantymon
$H_2SbHO_2 = [SbH(OH)_2]$	kwasy antymonowe	dihydroksidohydridoantymon
$HSbH_2O_2 = [SbH_2O(OH)]$	kwasy antymonowe	hydroksidodihydridoantymon
$HSbH_2O = [SbH_2(OH)]$	kwasy antymonowe	hydroksidodihydridoantymon
$H_3SO_4^+ = [SO(OH)_3]^+$	d	trihydroksidooksidosiarka(1+), triwodoro(tetraoksidosiarczan)(1+)
$H_2SO_4 = [SO_2(OH)_2]$	kwasy siarkowe	dihydroksidodioksidosiarka
$HSO_4^- = [SO_3(OH)]^-$	wodorosiarczan	hydroksidotrioksidosiarczan(1-)
$[SO_4]^{2-}$	siarczan	tetraoksidosiarczan(2-)
$HSHO_3 = [SHO_2(OH)]$	kwasy sulfonowe <sup>j</sup>	hydroksidohydridodioksidosiarka
$H_2SO_3 = [SO(OH)_2]$	kwasy siarkowe	dihydroksidooksidosiarka
$HSO_3^- = [SO_2(OH)]^-$	wodosiarczyn	hydroksidodioksidosiarczan(1-)
$[SO_3]^{2-}$	siarczyn	trioksidosiarczan(2-)
$HSHO_2 = [SHO(OH)]$	kwasy sulfinowe <sup>j</sup>	hydroksidohydridoantymon
$H_2SO_2 = [S(OH)_2]$	kwasy sulfoksylowe, sulfanodiol <sup>k</sup>	dihydroksidosiarka
$[SO_2]^{2-}$	sulfoksylian, sulfanodiolan <sup>k</sup>	dioksidosiarczan(2-)
$HSOH = [SH(OH)]$	sulfanol <sup>k</sup>	hydroksidohydridosiarka
$HSO^- = [SHO]^-$	sulfanolan <sup>k</sup>	oksidohydridosiarczan(1-)
$H_2S_2O_7 = [(HO)S(O)_2OS(O)_2(OH)]$	kwasy disiarkowe <sup>c</sup>	$\mu$ -oksidobis(hydroksidodioksidosiarka)
$[S_2O_7]^{2-} = [(O)_3SOS(O)_3]^{2-}$	disiarczan	$\mu$ -oksidobis(trioksidosiarczan)(2-)
$H_2S_2O_6 = [(HO)(O)_2SS(O)_2(OH)]$	kwasy ditionowe <sup>c,1</sup>	bis(hydroksidodioksidosiarka)(S-S), lub 1,4-dihydrido-2,2,3,3-tetraoksid-1,4-dioksy-2,3-disulfo-[4]katena
$[S_2O_6]^{2-} = [O_3SSO_3]^{2-}$	ditionian	bis(trioksidosiarczan)(S-S)(2-), lub 2,2,3,3-tetraoksid-1,4-dioksy-2,3-disulfo-[4]katenian(2-)
$H_2S_3O_6 = [(HO)(O)_2SSS(O)_2(OH)]$	kwasy tritionowe <sup>c,m</sup>	1,5-dihydrido-2,2,4,4-tetraoksid-1,5-dioksy-2,3,4-trisulfo-[5]katena
$H_2S_4O_6 = [(HO)(O)_2SSSS(O)_2(OH)]$	kwasy tetracionowe <sup>c,m</sup>	1,6-dihydrido-2,2,5,5-tetraoksid-1,6-dioksy-2,3,4,5-tetrasulfo-[6]katena

$H_2S_2O_5 = [(HO)(O)_2SS(O)OH]$	kwas dwusiarkawy <sup>n</sup>	dihydroksido-1κO,2κO-trioksid-1κ <sup>2</sup> O,2κO-disiarka(S-S)
$[S_2O_5]^{2-} = [O(O)_2SS(O)O]^{2-}$	disiarczyn <sup>n</sup>	pentaoksid-1κ <sup>3</sup> O,2κ <sup>2</sup> O-disiarczan(S-S)(2-)
$H_2S_2O_4 = [(HO)(O)SS(O)(OH)]$	kwas ditionawy <sup>c,1</sup>	bis(hydroksidooksidosiarka)(S-S), lub 1,4-dihydrido-2,3-dioksid-1,4-dioksy-2,3-disulfy-[4]katena
$[S_2O_4]^{2-} = [O_2SSO_2]^{2-}$	ditionin	bis(dioksidosiarczan)(S-S)(2-), lub 2,3-dioksid-1,4-dioksy-2,3-disulfy-[4]katenian(2-)
$H_2SeO_4 = [SeO_2(OH)_2]$	kwas selenowy	dihydroksidodioksidoselen
$[SeO_4]^{2-}$	selenian	tetraoksidoselenian(2-)
$H_2SeO_3 = [SeHO_2(OH)]$	kwas selonowy <sup>j,o</sup>	hydroksidohydridodioksidoselen
$H_2SeO_3 = [SeO(OH)_2]$	kwas selenawy <sup>o</sup>	dihydroksidooksidoselen
$[SeO_3]^{2-}$	selenin	trioksidoselenian(2-)
$HSeHO_2 = [SeHO(OH)]$	kwas selinowy	hydroksidohydridooksidoselen
$H_6TeO_6 = [Te(OH)_6]$	kwas ortotellurowy <sup>a</sup>	heksahydroksidotellur
$[TeO_6]^{6-}$	ortotelluran	heksaoksidotelluran(6-)
$H_2TeO_4 = [TeO_2(OH)_2]$	kwas tellurowy	dihydroksidodioksidotellur
$[TeO_4]^{2-}$	telluran	tetraoksidotelluran(2-)
$H_2TeO_3 = [TeO(OH)_2]$	kwas tellurawy	dihydroksidooksidotellur
$HTeHO_3 = [TeHO_2(OH)]$	kwas tellonowy <sup>j</sup>	hydroksidohydridodioksidotellur
$HTeHO_2 = [TeHO(OH)]$	kwas tellinowy <sup>j</sup>	hydroksidohydridooksidotellur
$HClO_4 = [ClO_3(OH)]$	kwas nadchlorowy	hydroksidotrioksidochlor
$[ClO_4]^-$	nadchloran	tetraoksidochloran(1-)
$HClO_3 = [ClO_2(OH)]$	kwas chlorowy	hydroksidodioksidochlor
$[ClO_3]^-$	chloran	trioksidochloran(1-)
$HClO_2 = [ClO(OH)]$	kwas chlorawy	hydroksidooksidochloran
$[ClO_2]^-$	chloryn	dioksidochloran(1-)
$HClO = [O(H)Cl]$	kwas podchlorawy	chloridooksidotlen
$[OCl]^-$	podchloryn	chloridotlenian(1-)
$HBrO_4 = [BrO_3(OH)]$	kwas nadbromowy	hydroksidotriksidobrom



$[\text{BrO}_4]^-$	nadbromian	tetraoksidobromian(1-)
$\text{HBrO}_3 = [\text{BrO}_2(\text{OH})]$	kwask bromowy	hydroksidodioksidobrom
$[\text{BrO}_3]^-$	bromian	trioksidobromian(1-)
$\text{HBrO}_2 = [\text{BrO}(\text{OH})]$	kwask bromawy	hydroksidooksidobrom
$[\text{BrO}_2]^-$	bromin	dioksidobromian(1-)
$\text{HBrO} = [\text{O}(\text{H})\text{Br}]$	kwask podbromawy	bromidohydridotlen
$[\text{OBr}]^-$	podbromin	bromidotlenian(1-)
$\text{H}_5\text{IO}_6 = [\text{IO}(\text{OH})_5]$	kwask ortonadjodowy <sup>a</sup>	pentahydroksidooksidojod
$[\text{IO}_6]^{5-}$	ortonadjodan <sup>a</sup>	heksaoksidojodan(5-)
$\text{HIO}_4 = [\text{IO}_3(\text{OH})]$	kwask nadjodowy <sup>a</sup>	hydroksidotriksidojod
$[\text{IO}_4]^-$	nadjodan <sup>a</sup>	tetraoksidojodan(1-)
$\text{HIO}_3 = [\text{IO}_2(\text{OH})]$	kwask jodowy	hydroksidodioksidojod
$[\text{IO}_3]^-$	jodan	trioksidojodan(1-)
$\text{HIO}_2 = [\text{IO}(\text{OH})]$	kwask jodawy	hydroksidooksidojod
$[\text{IO}_2]^-$	jodyn	dioksidojodan(1-)
$\text{HIO} = [\text{O}(\text{H})\text{I}]$	kwask podjodawy	hydridojodidotlen
$[\text{OI}]^-$	podjodyn	jodidotlenian(1-)

<sup>a</sup> Przedrostek ‘orto’ nie był w przeszłości używany konsekwentnie (Rozdział I-9 pozycji podanej w odnośniku 2). W przypadku kwasu borowego, kwasu krzemowego oraz kwasu fosforowego, w odniesieniu do których pominięcie ‘orto’ w nazwach nie powoduje niejednoznaczności, przedrostek ten został usunięty. Jedynymi przypadkami, w których użycie przedrostka ‘orto’ pozwala rozróżnić dwa różne związki jest kwas tellurowy oraz kwas nadjodowy (jak i również odpowiadające im aniony).

<sup>b</sup> Nazwy „kwask piorunowy” oraz „kwask izopiorunowy” nie były w przeszłości używane konsekwentnie. Związkiem nazwanym początkowo „kwaskem piorunowym” jest związek o wzorze HCNO, który nie należy do kwasów tlenowych, podczas gdy estry nazywane okazjonalnie „piorunianami” w chemii organicznej są związkami o ogólnym wzorze RONC, odpowiadające kwasowi tlenowemu HONC. Podana nazwa addytywna jednoznacznie określa strukturę związku. Zalecanymi nazwami w chemii organicznej są tlenek formonitrylu (ang. formonitrile oxide) dla HCNO oraz λ<sup>2</sup>-metylenohydroksylamina (ang. methylenedihydroxylamine) dla HONC. (Rozdział P-61.9 pozycji podanej w odnośniku 1 oraz Tabela IX pod pozycjami CHNO i CNO).

<sup>c</sup> Analogiczne nazwy można utworzyć dla wyższych oligomerów, np. kwask difosforowy, kwask trifosforowy itd.; kwask ditionowy, kwask tritionowy, kwask tetracionowy itd.; kwask ditionawy, tritionawy itd.

<sup>d</sup> Angielskie nazwy „nitric acidium”, „sulfuric acidium” itp. stosowane są dla sprotonowanych kwasów, stanowią połączenie kilku systemów nazewnictwa i są trudne do przetłumaczenia. Nazwy te nie są już dopuszczalne.

<sup>e</sup> Nazwą w oparciu o nomenklaturę podstawnikową jest azanol (ang. azanol). Jednakże, ze względu na zalecane nazwy dla pewnych organicznych pochodnych tego związku, związek  $\text{NH}_2\text{OH}$  sam w sobie jest uznawany jako związek macierzysty o nazwie hydroksyloamina.

<sup>f</sup> Nazwy są nazwami systematycznymi utworzonymi w oparciu o nomenklaturę podstawnikową. Zwyczajowe nazwy „kwas podazotawy” oraz „podazotyn” nie są dopuszczalne; poza tym, stosowany sposób użycia przedrostka ‘pod’ sugerowałby nazwy „kwas poddiazotawy” oraz „poddiazotyn”.

<sup>g</sup> Użycie nazwy „kwas fosforawy” oraz wzoru  $\text{H}_3\text{PO}_3$  było spotykane w literaturze zarówno dla  $[\text{P}(\text{OH})_3]$  jak i  $[\text{PHO}(\text{OH})_2]$ . Obecny wybór nazw dla tych dwóch związków jest zgodny z macierzystymi nazwami podany w Podrozdziale P-42.3 oraz P42.2 pozycji podanej w odnośniku 1.

<sup>h</sup> Nazwy są nazwami systematycznymi stworzonymi w oparciu o nomenklaturę podstawnikową. Nazwy zawierające słowo „kwas” nie są powszechnie używane dla dwóch izomerów  $\text{HPO}_2$ .

<sup>i</sup> Nazwy „kwas arsenowy”, „kwas arsenawy”, „kwas antymonowy” oraz „kwas antymonawy” są dopuszczalne ze względu na ich użycie jako nazw macierzystych w Podrozdziale P42.4 pozycji podanej w odnośniku 1.

<sup>j</sup> Używając nazw „kwas sulfonowy”, „kwas sulfinowy”, „kwas selenowy” należy zachować ostrożność. Nomenklatura podstawnikowa nakazuje użycie podstawienia w macierzystych wodorkach, nie w kwasach, kiedy tworzone są nazwy odpowiadających pochodnych funkcyjnych. Przykłady: trisulfanedisulfonic acid (not trisulfanediul...) (przypis m); kwas metanoseleninowy (nie metylo...); itd. Należy zauważyć, że podstawnikami ‘grupa sulfonylowa’, ‘grupa sulfinylowa’ itd. są  $-\text{S}(\text{O})_2-$ ,  $-\text{S}(\text{O})-$ , itd., a nie  $\text{HS}(\text{O})<$ ,  $\text{HS}(\text{O})-$ , itd.

<sup>k</sup> Nazwy są nazwami systematycznymi utworzonymi w oparciu o nomenklaturę podstawnikową. Nazwy oparte o nazwy zwyczajowe „kwas sulfoksyłowy” dla  $\text{S}(\text{OH})_2$  oraz „kwas sulfonowy” dla  $\text{HSOH}$ , oraz nazwy te same w sobie, nie są już dopuszczalne.

<sup>l</sup> Konsekwentne użycie przedrostka „pod” sugerowałoby nazwy „poddisiarkowy” dla kwasu ditionowego oraz „poddisiarkawy” dla kwasu ditionowego.

<sup>m</sup> Homologi „kwas tritionowy”, „kwas tetracionowy” itd. mogą być nazywane zgodnie z zasadami nomenklatury podstawnikowej jako sulfadisdulfonic acid, disulfanedisulfonic acid, etc.

<sup>n</sup> Zwyczajowa nazwa stwarza problem, gdyż niesymetryczna struktura nie jest strukturą do której można by odnieść budowę „dikwasu” (kwas disiarkawy byłby przedstawiony jako  $[\text{HO}(\text{O})\text{SOS}(\text{O})\text{OH}]$ ). Użycie nazwy w oparciu o nomenklaturę addytywną eliminuje ten problem, aczkolwiek problem związany z użyciem nazwy „kwas disiarkawy” jako nazwy macierzystej pozostaje w nomenklaturze chemii organicznej.

<sup>o</sup> Wzór  $\text{H}_2\text{SeO}_3$  był spotykany w literaturze w odniesieniu zarówno do kwasu selenowego jak i kwasu selenowego. Wybór nazw dla tych dwóch związków jest zgodny z nazwami macierzystymi podanymi w Podrozdziale P-42.1 oraz P-42.4 pozycji podanej w odnośniku 1.

### IR-8.3 Nomenklatura addytywna

Cząsteczki lub jony, które *formalnie* można traktować jako jednordzeniowe układy koordynacyjne, mogą być nazywane za pomocą systemu nomenklatury addytywnej, stosując reguły przedstawione w Rozdziale IR-7.

Przykłady:

1.  $\text{H}_3\text{SO}_4^+ = [\text{SO}(\text{OH})_3]^+$  trihydroksidooksidosiarka(1+)
2.  $\text{H}_2\text{SO}_4 = [\text{SO}_2(\text{OH})_2]$  dihydroksidodioksidosiarka
3.  $\text{HSO}_4^- = [\text{SO}_3(\text{OH})]^-$  hydroksidotrioksidosiarczan(1-)

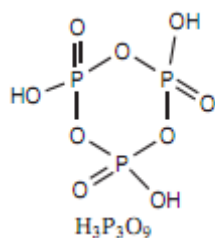
Struktury, które można rozpatrywać jako wielordzeniowe układy koordynacyjne mogą być nazywane jako takie (Podrozdział IR-7.3), lub mogą być nazywane używając systemu nazewnictwa stosowanego dla nieorganicznych układów łańcuchowych i cyklicznych (Podrozdział IR-7.4).

Zasadniczo, wybór metody w tym ostatnim przypadku jest arbitralny. Jednakże, system nomenklatury związków koordynacyjnych został rozwinięty w taki sposób, by można go było stosować do nazewnictwa złożonych związków kompleksowych z ligandami wieloatomowymi, wielokleszczowymi (w szczególności), oraz z ligandami wielokrotnie mostkowymi. Co więcej, rozróżnienie ligandów oraz atomów centralnych, wydające się oczywiste dla związków zazwyczaj rozpatrywanych jako związki koordynacyjne, nie jest jednoznaczne w przypadku polioksokwasów (polikwasów tlenowych?). Z tego powodu, nomenklatura addytywna, traktująca dany układ jako klasyczny związek koordynacyjny, wydaje się być zbyt zawiła dla nazewnictwa polioksokwasów tworzących względnie proste układy łańcuchowe i cykliczne. W takim przypadku o wiele prostszy do zastosowania jest system nomenklatury addytywnej stosowany dla nieorganicznych układów łańcuchowych i cyklicznych. Otrzymane za jego pomocą nazwy w prosty sposób można przełożyć na budowę danego związku. System ten jednak prowadzi do długich nazw w przypadku układów posiadających wiele lokantów. Przykłady wymienionych dwóch sposobów nazewnictwa nomenklatury addytywnej przedstawiono poniżej dla związków wielordzeniowych.

Przykłady:

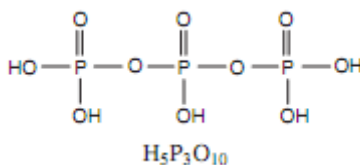
4. Związek zwyczajowo nazywany jako kwas difosforowy,  $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7 = [(\text{HO})_2\text{P}(\text{O})\text{OP}(\text{O})(\text{OH})_2]$ , jest zgodnie z zasadami systemu nomenklatury addytywnej, traktującej dany związek jako klasyczny układ koordynacyjny, nazywany jako:  
 $\mu$ -oksidobis[dihydroksidooksidofosfor]  
lub wg systemu traktującego ten związek jako pięcioczłonowy łańcuch z odpowiednimi ligandami jako:  
2,4-dihydroksido-1,5-dihydrido-2,4-dioksid-1,3,5-trioksy-2,4-difosfy-[5]katena

5. Związek zwyczajowo nazywany jako kwas cyklo-trifosforowy:



może być nazwany jako klasyczny układ koordynacyjny:  
 tri- $\mu$ -oksido-tris(hydroksidooksidofosfor),  
 lub jako sześcioczłonowy układ pierścieniowy z odpowiednimi ligandami:  
 2,4,6-trihydroksido-2,4,6-trioksy-1,3,5-trioksy-2,4,6-trifosfy-[6]cykl

6. Związek pochodny, kwas *katena*-trifosforowy



Może być nazwany jako trójrdzeniowy układ koordynacyjny:  
 pentahydroksido-1 $\kappa^2$ O,2 $\kappa^2$ O,3 $\kappa$ O-di- $\mu$ -oksido-1:3 $\kappa^2$ O;2:3 $\kappa^2$ O-trioksy-1 $\kappa$ O,2 $\kappa$ O,3 $\kappa$ O-  
 trifosfor,  
 lub jako symetryczny dwurdzeniowy układ koordynacyjny z mostkowym ligandem  
 fosforanowym:  
 $\mu$ -(hydroksidotrioksy-1 $\kappa$ O,2 $\kappa$ O'-fosforano)-bis(dihydroksidooksidofosfor),  
 lub jako jednordzeniowy układ koordynacyjny z dwoma ligandami fosforanowymi:  
 bis(dihydroksidodioksyfosforano)hydroksidooksidofosfor,  
 lub jako siedmioczłonowy układ łańcuchowy z odpowiednimi ligandami:  
 2,4,6-trihydroksido-1,7-dihydroksido-2,4,6-trioksy-1,3,5,7-tetraoksy-2,4,6-trifosfy-[7]katena.

Wszystkie nieorganiczne kwasy tlenowe dla których używanie nazw zwyczajowych zawierających słowo „kwas” jest wciąż dopuszczalne, w oparciu o obecne zalecenia, zostały wyszczególnione w Tabeli IR-8.1 wraz z odpowiadającym im nazwom utworzonym w oparciu o nomenklaturę addytywną. Przedstawiono w ten sposób w jaki sposób odpowiednie nazwy mogą być otrzymane.

Kilka nazw pominiętych w pozycji podanej w odnośniku 2, np. kwas selenowy i kwas podbromawy, zostało przywróconych ponieważ nie wykazują niejednoznaczności oraz pozostają w powszechnym użyciu (włączając ich użycie jako nazw macierzystych w nomenklaturze wymiany funkcyjnej, Podrozdział IR-8.6).

W Tabeli IR-8.1 zawarto również aniony otrzymane przez deprotonację obojętnych cząsteczek kwasów tlenowych. Wiele z tych anionów także posiada nazwy zwyczajowe, które są wciąż dopuszczalne, w niektórych przypadkach pomimo faktu ich oparcia o zasady nomenklatury już porzucone (np. azotyn/azotan oraz nadchloran/chloran/chloryn/podchloryn). W odniesieniu do nazw zawierających przedrostek „wodoro” należy zapoznać się z podrozdziałami IR-8.4 oraz IR-8.5.

Ważnym jest, by zwrócić uwagę, iż obecność danego związku w Tabeli IR-8.1 nie oznacza, że został on opisany w literaturze lub, że w przeszłości istniała potrzeba jego nazwania. Kilka nazw związków zawarto w tabeli wyłącznie dla kompletności oraz umożliwienia wyprowadzenia nazw macierzystych dla organicznych pochodnych tych związków.

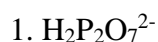
#### IR-8.4. Nomenklatura wodorowa

Jest to alternatywny system nomenklatury, którego można używać dla związków oraz jonów zawierających atomy wodoru. Tworząc nazwę używa się słowa „wodoro”, stosując w razie potrzeby odpowiedni przedrostek zwielokrotniający, który je poprzedza (np. diwodoro, triwodoro). Następnie, niestosując żadnych spacji, podaje się w odpowiednim nawiasie (Podrozdział IR 2.2) nazwę anionu utworzoną za pomocą nomenklatury addytywnej. Po tak utworzonym fragmencie (również nie stosując żadnej spacji), podaje się w nawiasie okrągłym liczbę wskazującą całkowity ładunek nazywanego indywiduum chemicznego (zasady tej nie stosuje się do indywiduów chemicznych pozbawionych ładunku).

Nazwy utworzone za pomocą nomenklatury wodorowej są użyteczne w przypadku związków lub jonów, w których sposób połączenia jonów wodorowych jest nieznany bądź nie jest wyszczególniony (tj. gdy brak jest informacji na temat tautomeru danego związku lub gdy informacji na temat sposobu połączeń atomów nie zamierza się wyszczególniać).

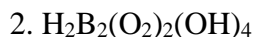
Niektóre z podanych poniżej przykładów, zostały szerzej omówione w dalszej części opracowania.

Przykłady:

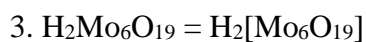


diwodoro(difosforan), lub

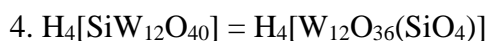
diwodoro[ $\mu$ -oksidobis(trioksidofosforan)](2-)



diwodoro(tetrahydroksidodi- $\mu$ -peroksido-diboran)



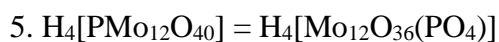
diwodoro(nonadekaoksidoheksamolibdenian)



tetrawodoro[(tetrakontaoksidokrzemododekawolfram)ian], lub

tetrawodoro[heksatriakontaoksidotetraoksidokrzemiano)dodekawolframian], lub

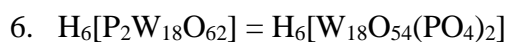
tetrawodoro(krzemododekawolframian)



tetrawodoro[tetrakontaoksidofosfordodekamolibdenian], lub

tetrawodoro[heksatriakontaoksidohexaoksidofosforano)dodekamolibdenian], lub

tetrawodoro(fosfordodekamolibdenian)



heksawodoro[doheksakontaoksidodifosforoktadekawolframian], lub

heksawodoro[tetrapentakontaoksidobis(tetraoksidofosforano)oktadekawolframian], lub

heksawodoro(difosforoktadekawolframian)



tetrawodoro(heksacyjanidożelazian)



diwodoro(heksachloridoplatynian) – woda (1/2)

## 9. HCN

wodoro(nitridowęglan)

W przypadku związku przedstawionego w przykładzie 1, jony wodorowe mogą być związane z dwoma atomami tlenu tego samego atomu fosforu, bądź mogą być związane z atomami tlenu w taki sposób, w przypadku którego każdy z atomów tlenu związany jest z innym atomem fosforu. Stąd, jak już wcześniej zaznaczono, nazwa stworzona w oparciu o system nomenklatury wodorowej nie zawsze w pełni określa budowę związku.

Analogicznie, nazwa podana w przykładzie 2, może odnosić się do dwóch różnych tautomerów związku. Podobna sytuacja ma miejsce dla związku, którego nazwa utworzona w oparciu o nomenklaturę konstytucyjną to „cyjanek wodoru”. Nazwy „hydridonitridowęgiel” (nomenklatura addytywna), „metylidynoazan” (nomenklatura podstawnikowa) oraz „formonitryl” (nomenklatura chemii organicznej) określają tautomer HCN.

System nomenklatury wodorowej może również być stosowany dla związków oraz jonów, w przypadku których tautomeria nie występuje, jeżeli zamierza się określić strukturę związku jako układ jonów wodorowych związanych z anionem:

Przykłady:

10.  $\text{HMnO}_4$  wodoro(tetraoksidomanganian)
11.  $\text{H}_2\text{MnO}_4$  diwodoro(tetraoksidomanganian)
12.  $\text{H}_2\text{CrO}_4$  diwodoro(tetraoksidochromian)
13.  $\text{HCrO}_4^-$  wodoro(tetraoksidochromian)(1-)
14.  $\text{H}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  diwodoro(heptaoksidochromian)
15.  $\text{H}_2\text{O}_2$  diwodoro(nadtlenek)
16.  $\text{HO}_2^-$  wodoro(nadtlenek)(1-)
17.  $\text{H}_2\text{S}$  diwodoro(siarczyk)
18.  $\text{H}_2\text{NO}_3^+$  diwodoro(trioksidoazotan)(1+)

Powyższe nazwy należy odróżnić od nazw systemu nomenklatury konstytucyjnej (ang. compositional names), takich jak „nadtlenek wodoru” dla  $\text{H}_2\text{O}_2$  oraz „siarczek wodoru” dla  $\text{H}_2\text{S}$ , w których pomiędzy nazwą składnika elektrododatniego oraz nazwą składnika elektroujemnego występuje spacja.

Nazwy systemu nomenklatury konstytucyjnej podane wyżej, zawierające słowo „wodoru” („hydrogen” w języku angielskim), zostały zaklasyfikowane jako nazwy „nomenklatury wodorowej” w dyskusji poświęconej kwasom tlenowym w Podrozdziale I-9.5 pozycji podanej w odnośniku 2 – nazwy takie zostały bogato zilustrowane przykładami. Jednakże, w celu uniknięcia niejednoznaczności, ich użycie nie jest zalecane. Przykładowo, nazwy utworzone w oparciu o nomenklaturę konstytucyjną „siarczek wodoru” oraz „siarczek(2-) wodoru” mogą odnosić się zarówno do związku o wzorze  $\text{H}_2\text{S}$  jak i również  $\text{HS}^-$ . Analogiczna sytuacja występuje w przypadku związku o wzorze  $\text{Na}_2\text{S}$ , który może zostać

nazwany jako siarczek sodu, siarczek disodu, siarczek(2-) sodu oraz siarczek(2-) disodu, za wyjątkiem mało prawdopodobnej interpretacji nazwy pierwszej oraz trzeciej jako  $\text{NaS}^-$ . W pozycji podanej w odnośniku 2, nazwa „wodorosiarczek(1-)” oraz „monowodorosiarczek” dla  $\text{HS}^-$  zostały zaproponowane w celu uniknięcia niejednoznaczności.

Przedstawiony w niniejszym opracowaniu sposób tworzenia nazw opartych o system nomenklatury wodorowej został utworzony w celu wyeliminowania powyższych dwuznaczności:

(i) słowo „wodoro” musi być połączone z resztą nazwy związku (nie może występować spacja),  
(ii) liczba atomów wodoru musi zostać wyszczególniona za pomocą przedrostka zwielokrotniającego,

(iii) część nazwy odnoszącej się do anionu musi znajdować się w odpowiednim nawiasie, oraz  
(iv) całkowity ładunek nazywanego indywiduum chemicznego musi zostać wyszczególniony.

Utworzonych wg powyższych zaleceń nazw nie można pomylić z nazwami innego typu.

Jedynym dopuszczalnym wyjątkiem jest zbiór kilku szczególnych, skróconych nazw anionów, wyszczególnionych w Podrozdziale IR-8.5.

W niektórych przypadkach, wystąpienie jakiegokolwiek niejednoznaczności nie jest możliwe i z tego powodu, rozróżnienie pomiędzy nazwami utworzonymi w oparciu o nomenklaturę konstytucyjną oraz wodorową nie jest takie ważne, szczególnie dla halogenowodorów. Stąd, związek o wzorze  $\text{HCl}$ , może być nazywany jako „chlerek wodoru” (nazwa utworzona w oparciu o nomenklaturę konstytucyjną) oraz „wodoro(chlorek)” (nazwa utworzona w oparciu o nomenklaturę wodorową).

Przykłady 1,3-6 oraz 14 (przedstawione wyżej) ukazują, że kwasy homo oraz heteropolitlenowe, jak również ich częściowo zdeprotonowane formy, mogą zostać nazwane wg zasad systemu nomenklatury wodorowej, jeżeli tylko nazwany zostanie odpowiadający im anion. W przykładach 4-6, dla każdego związku wyszczególniono trzy alternatywne nazwy. Dwie pierwsze nazwy posiadają utworzoną wg systemu nomenklatury addytywnej nazwę części anionowej związku. Różnice w nazwach anionów wynikają z różnego sposobu podziału jego budowy na ligandy oraz atomy centralne. Ostatnie w tych przykładach nazwy, zawierające przedrostki krzemo oraz fosforo, są przykładami nazw nomenklatury pół-systematycznej, która nie jest zalecana. Wymaga bowiem stosowania złożonych norm postępowania w celu uniknięcia niejednoznaczności.

Reguły stosowane w celu nadania nazw bardzo złożonym anionom homo- oraz heteropolitlenowych zostały podane w Rozdziale II-1 pozycji podanej w odnośniku 3.

Należy zwrócić uwagę, że przedstawione wyżej przykłady 10-14 ukazują, w jaki prosty sposób można nadawać nazwy związkom metali przejściowych, które w przeszłości były nazywane jako kwasy. Nazwy takie jak kwas nadmanganowy, kwas dichromowy, itd., nie zostały wyszczególnione w obecnych zaleceniach. Należą one do tej grupy związków, w odniesieniu do których występują trudności w usystematyzowaniu i stwierdzeniu tego, co należałoby wyszczególnić, oraz które spośród ich nazw są zbędne w nomenklaturze chemii organicznej. Jest to przeciwna sytuacja do przypadku analogicznych nazw zawierających słowo „kwas” dla związków pierwiastków grup głównych.

Ostatecznie zauważyć należy, iż przedstawione tutaj nazwy systemu nomenklatury wodorowej są tworzone w inny sposób niż nazwy soli oraz estrów organicznych kwasów poliwalentnych, w których przypadku, słowo „wodoro” zawsze podawane jest jako oddzielne (dot. języka ang?) zaraz przed nazwą anionu, np. wodoro ftalan potasu oraz wodoro ftalan etylu.

### **IR 8.5 Skrócone nazwy wodorowe dla niektórych anionów**

Część powszechnie znanych anionów posiada nazwy, które mogą być postrzegane jako skrócone formy nazw opartych o system nomenklatury wodorowej utworzonych według wyżej

przedstawionych reguł. Nazwy te, wszystkie pisane jako jedno słowo bez podawania ładunku, oraz bez nawiasów, są dopuszczalne ze względu na ich zwięzłość, obecność w dłuższym użyciu i jednoznaczność. Zaleca się, by listę tę traktować jako ograniczoną ze względu na niejednoznaczności, które mogą powstać w wielu innych przypadkach.

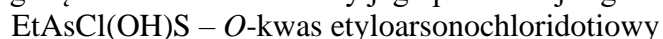
<i>Anion</i>	<i>Dopuszczalna skrócona nazwa wodorowa</i>	<i>Nazwa wodorowa</i>
$\text{H}_2\text{BO}_3^-$	diwodoroboran	diwodoro(trioksidoboran)(1-)
$\text{HBO}_3^{2-}$	wodoroboran	wodoro(trioksidoboran)(2-)
$\text{HSO}_4^-$	wodorosiarczan	wodoro(tetrakosodosiarczan)(1-)
$\text{HCO}_3^-$	wodorowęglan	wodoro(trioksidowęglan)(1-)
$\text{H}_2\text{PO}_4^-$	diwodorofosforan	diwodoro(tetraoksidofosforan)(1-)
$\text{HPO}_4^{2-}$	wodorofosforan	wodoro(tetraoksidofosforan)(2-)
$\text{H}_2\text{PO}_3^-$	diwodorofosforyn	diwodoro(trioksidofosforan)(1-)
$\text{HPO}_3^{2-}$	wodorofosforyn	wodoro(trioksidofosforan)(2-)
$\text{H}_2\text{PO}_2^-$	diwodorofosforan	diwodoro(difosforan)(1-)
$\text{HPO}_2^-$	wodorofosforan	wodoro(difosforan)(2-)
$\text{HSO}_3^-$	wodorosiarczyn	wodoro(trioksidosiarczyn)(1-)

### IR-8.6 Nomenklatura wymiany funkcyjnej dla pochodnych kwasów tlenowych

W nomenklaturze wymiany funkcyjnej, podstawienie grupy =O lub -OH macierzystego kwasu tlenowego (takie jak O->S, O->OO, OH->Cl, etc.) jest wskazywane przez użycie wrostków lub przedrostków, tak jak zostało to zilustrowane poniższymi przykładami (pozycja podana w odnośniku 1, Podrozdział P-67.1).

<i>Podstawienia</i>	<i>Przedrostek</i>	<i>Wrostek</i>
OH->NH <sub>2</sub>	amid(o)	amid(o)
O->OO	peroksy	perokso
O->S	tio	tio
O->Se	seleno	seleno
O->Te	telluro	telluro
OH->F	flouro	fluoryd(o)
OH->Cl	chloro	chloryd(o)
OH->Br	bromo	bromid(o)
OH->I	jodo	jodyd(o)
OH->CN	cyjano	cyjanid(o)

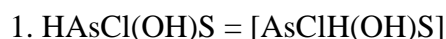
Przykład 5 w Podrozdziale IR-8.1 ilustruje użycie wrostków w operacji podstawienia OH->Cl oraz I->S, które pozwala na otrzymanie nazwy „*O*-kwas arsonochloridotyiowy” dla związku  $\text{HAsCl}(\text{OH})\text{S} = [\text{AsClH}(\text{OH})\text{S}]$ , będącego kwasem wywodzącym się z odpowiedniego kwasu macierzystego, wymaganą w celu nadania nazwy jego pochodnej organicznej:



Nazwy oparte o system nomenklatury wymiany funkcyjnej mogą być również używane do nadania nazw kwasom będących pochodnymi odpowiednich kwasów macierzystych. Jest to jednakże równoznaczne z wprowadzeniem dodatkowego systemu, który nie jest wymagany w nomenklaturze chemii nieorganicznej. Jak wspomniano wcześniej, nomenklatury addytywnej oraz podstawnikowej można używać w odniesieniu do wszystkich związków.



Przykład:



chloridohydroksidohydridosulfidoarsen (nomenklatura addytywna), lub  
chloro(hydroksy)- $\lambda^5$ -arsenotio (nomenklatura podstawnikowa)

Niemniej jednak, w Tabeli IR-8.2 wyszczególniono również indywidua chemiczne, które mogą być uznawane jako pochodne indywiduów występujących w Tabeli IR-8.1, otrzymane przez odpowiednie operacje podstawienia, i dla których nazwy zwyczajowe są nazwami otrzymanymi w oparciu o system nomenklatury wymiany funkcyjnej przy zastosowaniu odpowiednich przedrostków (np. „kwas tiosiarkowy”).

Problem, który mógłby się pojawić przy stosowaniu systemu nomenklatury wymiany funkcyjnej stosując odpowiednie przedrostki został przedstawiony na przykładzie tiokwasów. Nazwom kwas tritiowęglowy, kwas tetratiofosforowy itd., odpowiadałyby następujące nazwy anionów: tritiowęglan, tetratiofosforan, itd. Nazwy te wydają się być nazwami opartymi o system nomenklatury addytywnej, jako takie są jednak nieprawidłowe gdyż w nomenklaturze addytywnej przedrostkiem odpowiadającego w tym przypadku liganda jest „sulfido” bądź „sulfanodiido” (stąd poprawne ich nazwy to trisulfidowęglan(2-), tetrasulfidofosforan(3-), itd.). Podrozdział P-65.2 pozycji podanej w odnośniku 1 nakazuje użycie nazwy „kwas karbonotritiowy” opartej o wrostki, prowadząc do nazwy odpowiadającego anionu karbonotritianowego, która nie jest mylona z nazwą opartą o system nomenklatury addytywnej.

W Tabeli IR-8.2 podano kilka innych przykładów nazw opartych o system nomenklatury wymiany funkcyjnej (np. chlorek fosforylu, diamid kwasu siarkowego). Nazwy te są powszechnie znane i wciąż mogą być używane. Ten system nomenklatury nie jest jednak zalecany dla związków, które nie zostały tutaj wyszczególnione. Tak jak wspomniano wcześniej, systemy nomenklatury addytywnej oraz podstawnikowej mogą być zawsze używane w celu nadania właściwych nazw danym indywiduom chemicznym, tak jak zilustrowano to w Tabeli.

**Tabela IR-8.2** Dopuszczalne nazwy zwyczajowe, nazwy stworzone o system nomenklatury wymiany funkcyjnej oraz nomenklatury systematycznej (addytywnej) dla wybranych podstawionych kwasów tlenowych.

W Tabeli wyszczególniono dopuszczalne nazwy zwyczajowe, nazwy stworzone w oparciu o system nomenklatury wymiany funkcyjnej (Podrozdział IR-8.6) oraz nazwy systematyczne (addytywne) dla związków będących pochodnymi kwasów tlenowych wyszczególnionych w Tabeli IR-8.1, ich pewnych izomerów oraz odpowiadających anionów. Wyszczególnione związki są pochodnymi odpowiednich kwasów otrzymanymi przez podstawienie atomu/atomów tlenu, albo grupy/grup hydroksylowej/hydroksylowych innym/innymi atomem/atomami bądź grupą/grupami.

W niektórych przypadkach wzory podane są w klasycznym formacie, w których „kwasowe”(związane z atomami tlenu bądź innymi atomami grupy 16 układu okresowego) wodoru wyszczególniono na samym początku (np.  $H_2S_2O_3$ ). W większości przypadków wzory są także (lub tylko) zapisane jako odnoszące się do układów koordynacyjnych, zgodnie z regułami podanymi w Rozdziale IR-7 (np. „ $H_2SO_4 = [SO(OH)_2S]$ ”).

<i>Wzór</i>	<i>Dopuszczalna nazwa zwyczajowa</i>	<i>Nazwa systemu nomenklatury wymiany funkcyjnej</i>	<i>Nazwa systematyczna (addytywna)</i>
$HNO_4 = [NO_2(OOH)]$	kwas nadtlenoazotowy	kwas peroksyazotowy <sup>a</sup>	(dioksydanido)dioksidowodór
$NO_4^- = [NO_2(OO)]^-$	nadtlenoazotan	peroksyazotan <sup>a</sup>	dioksidoperoksidoozotan(1-)
$[NO(OOH)]$	kwas nadtlenoazotawy	kwas peroksyazotanowy <sup>a</sup>	(dioksydanido)oksidoozotan
$[NO(OO)]^-$	nadtlenoazotyln	peroksyazotyln <sup>a</sup>	oksidoperoksidoozotan(1-)
$NO_2NH_2 = N(NH_2)O_2$	nitramid	amid azotowy	amidodioksidoozotan, lub dihydrido-1κ <sup>2</sup> H-dioksidoo-2κ <sup>2</sup> O-diazot(N-N)
$H_3PO_5 = [PO(OH)_2(OOH)]$	kwas nadtlenofosforowy	kwas peroksyfosforowy (fosforonadtlenowy albo fosforoperoksoowy ?) ang. phosphoroperoxoic	(dioksydanido)dihydroksidooksidofosfor
$[PO_5]^{3-}$	nadtlenofosforan	peroksyfosforan (nadtlenofosforan?)	trioksidoperoksidofosforan(3-)
$[PCl_3O]$	trichlorek fosforylu, lub trichlorek tlenek fosforu	trichlorek fosforylu	trichloridooksidofosfor
$H_4P_2O_8 = [(OH)_2P(O)OOP(O)(OH)_2]$	kwas nadtlenodifosforowy	kwas 2-peroksydifosforowy	μ-peroksidoo-1κO,2κO'-bis(dihydroksidooksidofosfor)
$[P_2O_8]^{2-} = [O_3POOPO_3]^{4-}$	nadtlenodifosforan	2-peroksydifosforan	μ-peroksidoo-1κO,2κO'-bis(trioksidofosforan)(4-)
$H_2SO_5 = [SO_2(OH)(OOH)]$	kwas nadtlenosiarkowy	kwas peroksysiarkowy	(dioksydanido)hydroksidooksidosiarka
$[SO_5]^{2-} = [SO_3(OO)]^{2-}$	nadtlenosiarczan	peroksysiarczan	trioksidoperoksidosiarczan(2-)

$H_2S_2O_8$ [(OH)S(O) <sub>2</sub> OOS(O) <sub>2</sub> (OH)]	= kwas nadtlenodisiarkowy	kwas 2-peroksydysiarkowy	μ-peroksido-1κO,2κO'-bis(hydroksidodioksidosiarka)
$[S_2O_8]^{2-} = [O_3SOOSO_3]^{2-}$	nadtlenodisiarczan	2-peroksydisiarczan	μ-peroksido-1κO,2κO'-bis(trioksidosiarczan)(2-)
$H_2S_2O_3 = [SO(OH)_2S]$	kwas tiosiarkowy	O-kwas siarkotowy (albo tiosiarkowy ?) ang. sulfurothioc	dihydroksidooksidosulfidosiarka
$H_2S_2O_3 = [SO_2(OH)(SH)]$	kwas tiosiarkowy	S-kwas siarkotowy (albo tiosiarkowy ?) ang. sulfurothioc	hydroksidiodioskdyosulfanidosiarka(2-)
$S_2O_3^{2-} = [SO_3S]^{2-}$	tiosiarczan	siarkotian (and.sulfurotioate)? tiosiarczan(?)	trioksidosulfidosiarczan(2-)
$H_2S_2O_2 = [S(OH)_2S]$	kwas tiosiarkawy	O-kwas tiosiarkawy (siarkotiawy) and. sulfurothious	dihydroksidosulfidosiarka
$H_2S_2O_2 = [SO(OH)(SH)]$	kwas tiosiarkawy	S-kwas tiosiarkawy (siarkotiawy)	hydroksidooksidosulfanidosiarka
$[SO_2S]^{2-}$	tiosiarczyn	tiosiarczyn (ang. sulfurothioite) siarkotyń???	dioksidosulfidosiarczan(2-)
$SO_2Cl_2 = [SCl_2O_2]$	dichlorek sulfurylu, lub dichlorek ditlenek sulfurylu	dichlorek sulfurylu	dichloridodioksidosiarka
$SOCl_2 = [SCl_2O]$	dichlorek tionylu, lub dichlorek tlenek siarki	dichlorek siarkawy (ang. sulfurous)	dichloridooksidosiarka
$[S(NH_2)O_2(OH)]$	kwas sulfaminowy	kwas siarkoamidowy (ang. sulfuramidic)	amidohydroksidodioksidosiarka
$[S(NH_2)_2O_2]$	diamid siarkowy (ang. sulfuric diamide)	diamid siarkowy (ang. sulfuric diamide)	diamidodioksidosiarka
$HSCN = [C(N)(SH)]$	kwas tiocyjanowy		nitridosulfanidowęgiel
$HNCS = [C(NH)S]$	kwas izotiocyjanowy		imidosulfidowęgiel
$SCN^-$	tiocyjanian		nitridosulfidowęglian(1-)

<sup>a</sup> W pozycji podanej w odnośniku 4 (Reguła 5.22) podane nazwy są częściej tworzone przy użyciu przedrostka „perokso” (ang. „peroxo”) niż „peroksy” (ang. „peroxy”). Jednakże w pozycji podanej w odnośniku 2, przedrostek „perokso” jest pominięty, bez podania żadnej przyczyny, oraz bez podania żadnych innych przedrostków, które mogłyby być zamiast niego używane. Nazwy z przedrostkiem „peroksy” są w częstym użyciu. Co więcej, ogólna reguła stosowana w nomenklaturze wymiany funkcyjnej (Odnośnik 1, Podrozdział P-15.5) narzuca użycie przedrostka „peroksy” dla operacji podstawienia –O– → –OO– (jest to w przeciwieństwie do użycia dla tej operacji wrostka „perokso”). Mając na uwadze powyższe, podane wyżej nazwy utworzone zostały przy użyciu przedrostka „peroksy”. Dla większości jednordzeniowych kwasów tlenowych, reguły podane w odnośniku 1 (Podrozdział P-67.1), nakazują użycie wrostków w nazwach systematycznych; w odniesieniu do tych przypadków, odpowiednie

nazwy podane zostały w kolejnej kolumnie. Użycie przedrostków dla nadania nazw odpowiedniemu kwasowi azotowemu, azotawemu oraz kwasom dwurdzeniowym, jest również podane w powyższej Tabeli.

### **IR-8.7 Odnosniki literaturowe**

1. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, eds. W.H. Powell and H. Favre, Royal Society of Chemistry, in preparation
2. *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
3. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001
4. *IUPAC Nomenclature of Inorganic Chemistry, Second Edition, Definitive Rules 1970*, Butterworths, London, 1971.

## **IR-9 Związki koordynacyjne**

### **Spis treści**

#### **IR-9.1 Wprowadzenie**

##### **IR-9.1.1 Wiadomości ogólne**

##### **IR-9.1.2 Definicje**

###### **IR-9.1.2.1 Wprowadzenie do teorii związków koordynacyjnych**

###### **IR-9.1.2.2 Związki koordynacyjne oraz jednostka koordynacyjna**

###### **IR-9.1.2.3 Atom centralny**

###### **IR-9.1.2.4 Ligandy**

###### **IR-9.1.2.5 Wielościan koordynacyjny**

###### **IR-9.1.2.6 Liczba koordynacji**

###### **IR-9.1.2.7 Chelatacja**

###### **IR-9.1.2.8 Stopień utlenienia**

###### **IR-9.1.2.9 Nomenklatura koordynacyjna: nomenklatura addytywna**

###### **IR-9.1.2.10 Ligandy mostkujące**

###### **IR-9.1.2.11 Wiązania metal-metal**

#### **IR-9.2 Konstytucja związków koordynacyjnych – opis**

##### **IR-9.2.1 Wiadomości ogólne**

##### **IR-9.2.2 Nazwy związków koordynacyjnych**

###### **IR-9.2.2.1 Kolejność nazw ligandów oraz atomów centralnych w nazwach związków koordynacyjnych**

###### **IR-9.2.2.2 Liczba ligandów w jednostce koordynacyjnej**

###### **IR-9.2.2.3 Używanie nazw ligandów**

###### **IR-9.2.2.4 Liczby ładunku, liczby utlenienia oraz stosunki stechiometryczne jonów**

##### **IR-9.2.3 Wzory związków koordynacyjnych**

###### **IR-9.2.3.1 Kolejność symboli we wzorze związku koordynacyjnego**

###### **IR-9.2.3.2 Stosowanie nawiasów**

###### **IR-9.2.3.3 Ładunki jonów oraz stopnie utlenienia**

###### **IR-9.2.3.4 Stosowanie skrótów**

##### **IR-9.2.4 Określanie atomów donorowych**

###### **IR-9.2.4.1 Wiadomości ogólne**

###### **IR-9.2.4.2 Konwencja kappa**

###### **IR-9.2.4.3 Porównanie konwencji eta oraz kappa**

###### **IR-9.2.4.4 Użycie wyłącznie symboli atomów donorowych w nazwach**

##### **IR-9.2.5 Wielordzeniowe związki koordynacyjne**

###### **IR-9.2.5.1 Wiadomości ogólne**

###### **IR-9.2.5.2 Ligandy mostkowe**

###### **IR-9.2.5.3 Wiązania metal – metal**

###### **IR-9.2.5.4 Symetryczne dwurdzeniowe jednostki koordynacyjne**

###### **IR-9.2.5.5 Niesymetryczne dwurdzeniowe jednostki koordynacyjne**

###### **IR-9.2.5.6 Struktury trójrdzeniowe i większe**

**IR-9.2.5.7 Klasterstwo wielojądrowe: symetryczne centralne jednostki strukturalne**

**IR-9.3 Opis konfiguracji jednostek koordynacyjnych**

**IR-9.3.1 Wprowadzenie**

**IR-9.3.2 Opis geometrii koordynacyjnej**

**IR-9.3.2.1 Symbol wielościanu koordynacyjnego**

**IR-9.3.2.2 Wybór między blisko związanymi geometriami**

**IR-9.3.3 Opisywanie konfiguracji - rozróżnienie pomiędzy diastereoizomerami**

**IR-9.3.3.1 Informacje ogólne**

**IR-9.3.3.2 Wskaźnik konfiguracyjny**

**IR-9.3.3.3 Układy koordynacyjne kwadratowe (*SP-4*)**

**IR-9.3.3.5 Układy koordynacyjne o geometrii piramidy o podstawie kwadratu (*SPY-4, SPY-5*)**

**IR-9.3.3.6 Układy koordynacyjne o geometrii bipiramidy (*TBPY-5, PBPY-7, HBPY-8 i HBPY-9*).**

**IR-9.3.3.7 Układy T-kształtne (*TS-3*)**

**IR-9.3.3.8 Układy typu podparta deska**

**IR-9.3.4 Opis konfiguracji absolutnej - rozróżnienie diastereoizomerów**

**IR-9.3.4.1 Wiadomości wstępne**

**IR-9.3.4.2 Konwencja R/S dla centrów tetraedrycznych**

**IR-9.3.4.3 Konwencja R/S dla centrów o strukturze bipiramidy trygonalnej**

**IR-9.3.4.4 Konwencja C/A dla centrów o strukturze innych wielościanów**

**IR-9.3.4.5 Konwencja C/A dla centrów o strukturze bipiramidy trygonalnej**

**IR-9.3.4.6 Konwencja C/A dla centrów o strukturze piramidy o podstawie kwadratu**

**IR-9.3.4.7 Konwencja C/A dla centrów o strukturze podpartej deski**

**IR-9.3.4.8 Konwencja C/A dla centrów oktaedrycznych**

**IR-9.3.4.9 Konwencja C/A dla centrów o strukturze słupa trygonalnego**

**IR-9.3.4.10 Konwencja C/A dla innych centrów o strukturze bipiramidy**

**IR-9.3.4.11 Konwencja skośnych prostych**

**IR-9.3.4.12 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do oktaedrycznych tris(didentnych) jednostek koordynacyjnych**

**IR-9.3.4.13 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do oktaedrycznych bis(didentnych) jednostek koordynacyjnych**

**IR-9.3.4.14 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do konformacji pierścieni chelatowych**

**IR-9.3.5 Określenia pierwszeństwa ligandów**

**IR-9.3.5.1 Wiadomości ogólne**

**IR-9.3.5.2 Liczby pierwszeństwa**

**IR-9.3.5.3 Konwencja znaków prim**

**IR-9.4 Uwagi końcowe**

**IR-9.5 Odnosiłki literaturowe**

## IR-9.1 Wprowadzenie

### IR-9.1.1 Wiadomości ogólne

Rozdział ten przedstawia podstawowe definicje i zasady dotyczące tworzenia wzorów i nazewnictwa związków koordynacyjnych. Wyjaśniono tu kluczowe pojęcia, takie jak jednostka koordynacyjna, wielościan koordynacyjny, liczba koordynacyjna oraz ligandy mostkujące. Omówiono także rolę nomenklatury addytywnej (Rozdział IR-7). Definicje te stanowią podstawę do tworzenia nazw i wzorów związków koordynacyjnych, co umożliwia precyzyjne określenie ich składu. W nazwach i wzorach zawarte są informacje o atomie centralnym, dołączonych ligandach oraz całkowitym ładunku związku. W celu rozróżnienia możliwych diastereoizomerów i enancjomerów wprowadzono odpowiednie deskryptory stereochemiczne. W celu opisanego konfiguracji związku koordynacyjnego, należy najpierw określić jego geometrię za pomocą symboli wielościanów koordynacyjnych (Podrozdział IR-9.3.2.1). Kolejnym krokiem jest ustalenie wzajemnego położenia ligandów względem wielościanu koordynacyjnego przy użyciu wskaźników konfiguracyjnych (Podrozdział IR-9.3.3). Wskaźnik konfiguracyjny tworzy się na podstawie ciągu liczb pierwszeństwa ligandów, które ustala się według zasad właściwych dla danej geometrii. W razie potrzeby chiralność związku opisuje się wykorzystując liczby pierwszeństwa ligandów (Podrozdział IR-9.3.4). Warto zaznaczyć, że używane liczby pierwszeństwa odnoszą się do składu chemicznego ligandów. Szczegółowe reguły ich wyznaczania można znaleźć w Podrozdziale P-91 źródła wymienionego w przypisie 1, a ich zarys przedstawiono w Podrozdziale IR-9.3.5.

### IR-9.1.2 Definicje

#### IR-9.1.2.1 Wprowadzenie do teorii związków koordynacyjnych

Rozwój teorii koordynacji i wyodrębnienie klasy związków nazywanych związkami koordynacyjnymi rozpoczęły się wraz z historycznie ważnymi pojęciami wartościowości głównej i pobocznej. Wartościowości główne wywodzą się ze stechiometrii prostych związków, takich jak  $\text{NiCl}_2$ ,  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$  i  $\text{PtCl}_2$ . Jednak, gdy do tych związków dodawano inne proste i trwałe substancje (np.  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{KCl}$ ), obserwowano powstawanie nowych związków, takich jak  $\text{NiCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Co}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  czy  $\text{PtCl}_2 \cdot 2\text{KCl}$ . Ze względu na złożoną stechiometrię układy te nazwano związkami kompleksowymi, a ich powstawanie powiązano z pewnymi konkretnymi pierwiastkami metalicznymi. Liczba cząsteczek danej substancji, którą można było dodać do prostych związków, przyczyniła się do rozwoju pojęcia wartościowości pobocznej.

Rozpoznanie zależności między związkami koordynacyjnymi doprowadziło do powstania teorii koordynacji i nazewnictwa związków koordynacyjnych opartej na nomenklaturze addytywnej. Podstawą każdego związku koordynacyjnego jest jednostka koordynacyjna, zwana też kompleksem, w której atom centralny połączony jest z otaczającymi go grupami. Ze względu na możliwe niejednoznaczności, stosowanie pojęcia „kompleks” w nomenklaturze chemii nieorganicznej jako synonim jednostki koordynacyjnej nie jest zalecane. Związek koordynacyjny może występować jako samodzielna jednostka koordynacyjna lub zawierać ją jako jeden ze składników.

Choć teoria koordynacji znajduje główne zastosowanie w chemii związków metali, można ją również wykorzystać do opisu innych układów, w których jeden lub więcej atomów centralnych wiąże się z różnymi grupami. Zastosowanie nomenklatury addytywnej do tego typu połączeń zostało krótko przedstawione i zilustrowane przykładami w Rozdziale IR-7, a obszernie opisane dla kwasów nieorganicznych w Rozdziale IR-8.



### IR-9.1.2.2 Związki koordynacyjne oraz jednostka koordynacyjna

Związek koordynacyjny to każdy związek zawierający jednostkę koordynacyjną, czyli jon lub obojętną cząsteczkę, w której atom centralny, zazwyczaj metal, otoczony jest innymi atomami lub grupami atomów, zwanymi ligandami. Zgodnie z klasyczną definicją, ligandy mogą wysycać zarówno poboczną, jak i główną wartościowość atomu centralnego. Suma tych wartościowości, nosi nazwę liczby koordynacyjnej (Podrozdział IR-9.1.2.6). We wzorach związków koordynacyjnych jednostkę koordynacyjną ujmuje się w nawias kwadratowy, niezależnie od jej ładunku (Podrozdział IR-9.2.3.2).

Przykłady:

1.  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$
2.  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$
3.  $[\text{Fe}_3(\text{CO})_{12}]$

### IR-9.1.2.3 Atom centralny

Atom centralny to atom jednostki koordynacyjnej, wokół którego zgrupowane są inne atomy lub grupy atomów (ligandy). Zajmuje on centralne miejsce w tej jednostce. Przykładowo, atomami centralnymi w układach  $[\text{NiCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ ,  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  i  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$  są odpowiednio nikiel, kobalt oraz platyna. Ogólnie rzecz biorąc, nadawanie nazwy złożonej jednostce koordynacyjnej jest prostsze, gdy wybierze się więcej niż jeden atom centralny (Podrozdział IR-9.2.5) oraz określi się sposób połączeń w strukturze danego układu za pomocą konwencji *kappa* (Podrozdział IR-9.2.4.2).

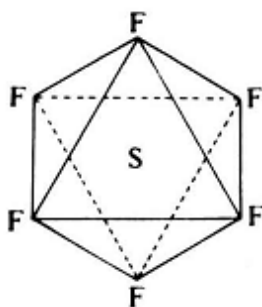
### IR-9.1.2.4 Ligandy

Ligandy to atomy lub grupy atomów związane z atomem centralnym. Rdzeń tego słowa jest w języku angielskim często wykorzystywany do tworzenia innych określeń, takich jak "*ligate*" (oznaczające koordynować jako ligand) oraz imiesłowów "*ligating*" i "*ligated*" (koordynujący lub związany koordynacyjnie). Terminy "*atom koordynujący*" (ang. *ligating atom*) i "*atom donorowy*" (ang. *donor atom*) są używane zamiennie.

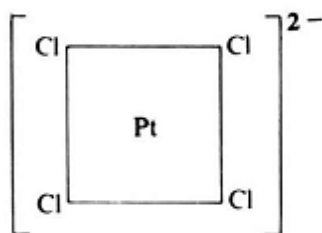
### IR-9.1.2.5 Wielościan koordynacyjny

Przyjmuje się, że atomy liganda bezpośrednio związane z atomem centralnym wyznaczają wielościan koordynacyjny (bądź wielokąt) wokół tego atomu. Na przykład  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  jest jodem oktaedrycznym, a  $[\text{PtCl}_4]^{2-}$  jest jodem płaskim, kwadratowym. W tych przypadkach liczba koordynacyjna równa jest liczbie wierzchołków w wielościanie koordynacyjnym. Wyjątki od tej reguły spotyka się dla układów, w których jeden lub więcej ligandów koordynuje do atomu centralnego przez dwa lub więcej atomów przyległych, chyba że przyległe atomy traktuje się jako pojedynczy ligand zajmujący jeden wierzchołek danego wielościanu koordynacyjnego.

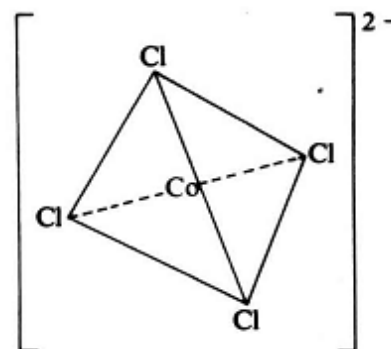
Przykłady:



1. oktaedryczny wielościan koordynacyjny



2. płaski, kwadratowy wielokąt koordynacyjny



3. tetraedryczny wielościan koordynacyjny

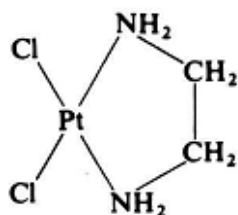
### IR-9.1.2.6 Liczba koordynacyjna

Dla związków koordynacyjnych liczba koordynacyjna równa jest liczbie wiązań  $\sigma$  utworzonych między ligandami a atomem centralnym. Jeżeli między ligandem a atomem centralnym utworzone zostają wiązania zarówno  $\sigma$  jak i  $\pi$ , co na przykład ma miejsce w przypadku ligandów takich jak  $\text{CN}^-$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  oraz  $\text{PMe}_3$ , wiązań  $\pi$  nie bierze się pod uwagę w określaniu liczby koordynacyjnej.

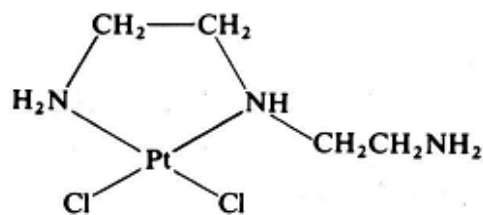
### IR-9.1.2.7 Chelatacja

Chelatacja (chelatowanie) jest to koordynowanie przez ligand tego samego atomu centralnego za pomocą co najmniej dwóch niepołączonych bezpośrednio ze sobą atomów będących donorami pary elektronowej typu  $\sigma$ . Liczba takich koordynujących atomów należących do danego liganda wskazywana jest za pomocą przymiotników monodentyczny, didentyczny, tridentyczny, tetradentyczny, pentadentyczny itd. (por. Tabela IV z listą przedrostków liczbowych). Liczba atomów donorowych danego liganda związana z tym samym atomem centralnym nazywa jest denticznością (ang. *denticity*).

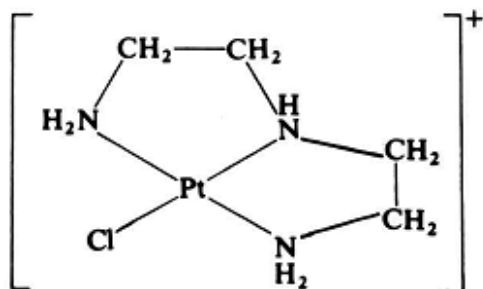
Przykłady:



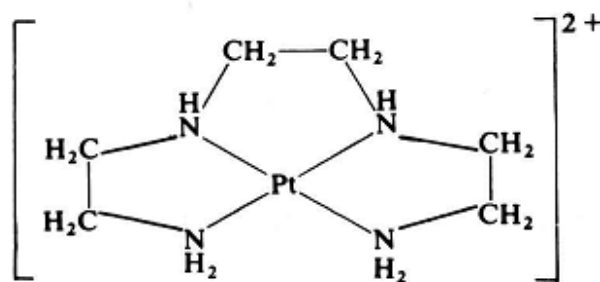
1. chelatacja didentyczna



2. chelatacja didentyczna



3. chelatacja tridentyczna



4. chelatacja tetradentyczna

Struktury cykliczne, które zostają utworzone podczas koordynacji danego liganda przez więcej niż jeden atom donorowy do tego samego atomu centralnego, noszą nazwę pierścieni chelatowych, a sposób koordynacji owych atomów donorowych nazywany jest chelatacją.

Jeżeli potencjalnie didentyczny ligand, taki jak etano-1,2-diamina, koordynuje do dwóch jonów metalu w sposób monodentyczny względem każdego z nich, to nie tworzy wówczas pierścienia chelatowego tylko *mostek*.

Przykład:



Alkeny, areny oraz inne nienasycone cząsteczki, wiążą się z atomami centralnymi przez jeden bądź wszystkie atomy objęte wiązaniem wielokrotnym, tworząc w rezultacie związki organometaliczne. Związki koordynacyjne i organometaliczne, pomimo pewnych podobieństw w zasadach nazewnictwa, znacząco się od siebie różnią. Z tego względu związkom metaloorganicznym poświęcono osobny Rozdział IR-10.

### IR-9.1.2.8 Stopień utlenienia

Stopień utlenienia atomu centralnego w jednostce koordynacyjnej zdefiniowany jest jako ładunek, który miałby ten atom, gdyby wszystkie ligandy, wraz z ich parami elektronowymi współdzielonymi z atomem centralnym, zostały usunięte. Stopień utlenienia podaje się przy użyciu rzymskiego zapisu liczb. Należy podkreślić, że stopień utlenienia jest wskaźnikiem wyprowadzonym z prostego oraz czysto formalnego zbioru reguł (Podrozdział IR-4.6.1 oraz IR-5.4.2.2) i nie jest wskaźnikiem, który bezpośrednio określa rozkład elektronów. W pewnych przypadkach formalizm ten nie prowadzi do uzyskania stopni utlenienia atomu centralnego, które byłyby możliwe do zaakceptowania. W odniesieniu do tego typu niejednoznacznych sytuacji, w nomenklaturze przyjmuje się najczęściej ładunek jednostki koordynacyjnej. W poniższych przykładach zilustrowano zależności między ładunkiem jednostki koordynacyjnej,

liczbami oraz ładunkami ligandów oraz wyprowadzonym stopniem utleniania atomu centralnego.

Lp.	Wzór jednostki koordynacyjnej	Ligandy	Stopień utlenienia atomu centralnego
1.	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	6 $\text{NH}_3$	III
2.	$[\text{CoCl}_4]^{2-}$	4 $\text{Cl}^-$	II
3.	$[\text{MnO}_4]^-$	4 $\text{O}^{2-}$	VII
4.	$[\text{MnFO}_3]$	3 $\text{O}^{2-}$ + 1 $\text{F}^-$	VII
5.	$[\text{Co}(\text{CN})_5\text{H}]^{3-}$	5 $\text{CN}^-$ + 1 $\text{H}^-$	III
6.	$[\text{Fe}(\text{CO})_4]^{2-}$	4 $\text{CO}$	-II

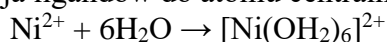
### IR-9.1.2.9 Nomenklatura koordynacyjna: nomenklatura addytywna

Kiedy rozwijano teorię koordynacji powstawanie związków koordynacyjnych wiązano z addycją niezależnych oraz trwałych związków do prostego związku centralnego. Z tego powodu nadawano im nazwy zgodnie z zasadą addytywności, łącząc nazwę prostego związku centralnego z nazwami wiążących się substancji. Zasada ta pozostaje podstawą nazewnictwa związków koordynacyjnych.

Nazwa budowana jest wokół nazwy atomu centralnego, tak jak wokół atomu centralnego buduje się jednostkę koordynacyjną.

Przykłady:

1. Addycja ligandów do atomu centralnego:



Addycja nazwy ligandów do nazwy atomu centralnego:

heksaakwanikiel(II)

Ten system nazewnictwa można rozszerzyć na bardziej złożone struktury, w których atomy centralne (wraz z ich ligandami) łączą się ze sobą, tworząc układy wielojądrowe z jednostek jednojądrowych. Zazwyczaj łatwiej jest nazwać skomplikowane struktury traktując je właśnie jako związki wielordzeniowe (patrz Rozdział IR-9.2.5)

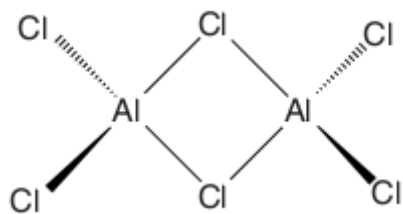
### IR-9.1.2.10 Ligandy mostkujące

W jednostkach wielojądrowych ligand może występować w roli grupy mostkującej poprzez jednoczesne tworzenie wiązań z dwoma lub większą liczbą atomów centralnych. Mostkowanie w nazwach oraz wzorach związków oznaczane jest przez dodanie symbolu  $\mu$  jako przedrostka do wzoru lub nazwy liganda (Podrozdział IR-9.2.5.2).

Ligandy mostkujące łączą ze sobą atomy centralne, tworząc jednostki koordynacyjne mające więcej niż jeden atom centralny. Liczbę atomów centralnych połączonych w jedną jednostkę koordynacyjną przez ligandy mostkowe lub bezpośrednie wiązania między atomami centralnymi określa się używając przymiotników dwujądrowy, trójjądrowy, czterojądrowy, itd. Krotność mostka jest liczbą atomów centralnych połączonych przez dany ligand mostkujący (Rozdział IR-9.2.5.2). Mostkowanie może być realizowane przez jeden atom lub przez dłuższy układ atomów.

Przykład:

- 1.



$[Al_2Cl_4(\mu-Cl)_2]$  lub  $[Cl_2Al(\mu-Cl)_2AlCl_2]$   
 di- $\mu$ -chlorido-tetrachlorido-1 $\kappa^2Cl$ ,2 $\kappa^2Cl$ -diglin

### IR-9.1.2.11 Wiązania metal-metal

Proste struktury, które zawierają wiązanie metal-metal mogą zostać w łatwy sposób opisane za pomocą nomenklatury addytywnej (Podrozdział IR-9.2.5.3). Trudności pojawiają się, gdy rozważane są układy obejmujące trzy lub więcej atomów centralnych. Układy takie nazywane są klastrami atomów centralnych i zostały omówione w Podrozdziale IR-9.2.5.6 oraz IR-9.2.5.7.

Przykłady:

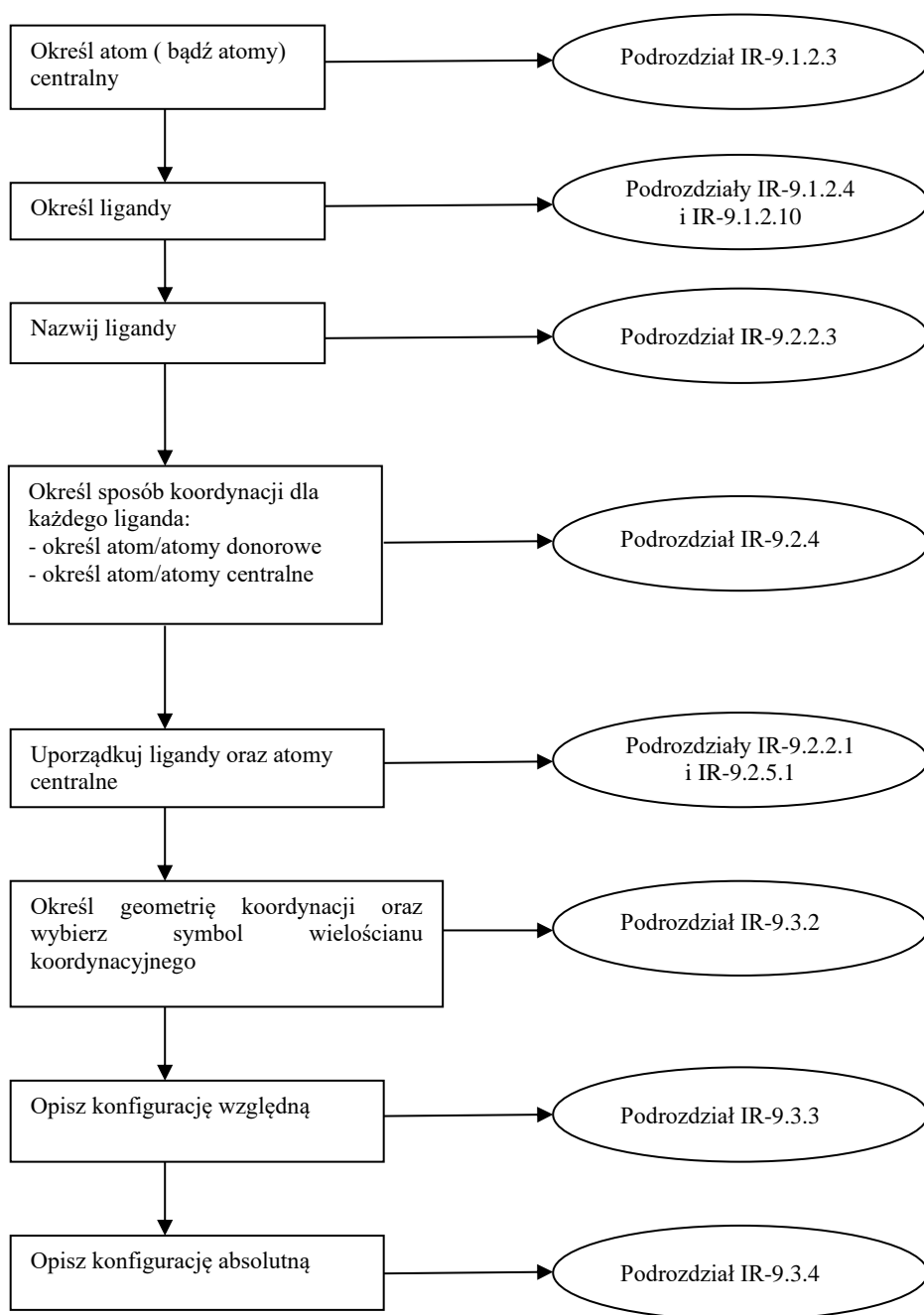
1.  $[Br_4ReReBr_4]^{2+}$   
 bis(tetrabromidoren)( $Re-Re$ )(2+)
2.  $[(OC)_5ReCo(CO)_4]$   
 nonakarbonylo-1 $\kappa^5C$ ,2 $\kappa^4C$ -renkobalt( $Re-Co$ )

## IR-9.2 OPIS SKŁADU ZWIĄZKÓW KOORDYNACYJNYCH

### IR-9.2.1 Wiadomości ogólne

Aby opisać skład danego związku można wybrać jedną z trzech dostępnych metod: narysować jego strukturę (tj. podać jego wzór strukturalny), podać nazwę lub podać wzór. Rysunek struktury (wzór strukturalny) związku zawiera informacje o składnikach strukturalnych danej cząsteczki jak i również ich wzajemnych zależnościach stereochemicznych. Często jednak zamieszczanie w tekście pełnych wzorów strukturalnych nie jest możliwe. W takich przypadkach, aby opisać skład danego związku, używa się ich nazw bądź wzorów.

Nazwa związku koordynacyjnego dostarcza szczegółowych informacji na temat obecnych w nim składników strukturalnych. Jednakże, co jest bardzo ważne, nazwa taka powinna jednoznacznie definiować dany związek. Z tego powodu, w celu zbudowania nazwy związku, należy stosować odpowiedni zbiór reguł. Poniższy Podrozdział zawiera szczegółowe informacje na ich temat jak i również podaje przykłady ich użycia.



Dla bardziej złożonych struktur związków, prościej jest utworzyć nazwę wybierając kilka atomów centralnych (Podrozdział IR-9.2.5.)

Przykłady podano w Tabelach VII oraz IX. Ligandy anionowe wymagają użycia określonej końcówki.

Ogólnie stosowana jest konwencja  $\kappa$  (Podrozdziały IR-9.2.4.2 oraz IR-10.2.3.3). Należy zwrócić uwagę na użycie  $\eta$ , kiedy atomy koordynujące są ze sobą bezpośrednio połączone.

Nazwy ligandów porządkowane są alfabetycznie. Nazwy atomów centralnych porządkowane są wg ich położenia w Tabeli VI.

Dla większość struktur, geometria koordynacji jest zniekształcona. Należy wybrać wielościan koordynacyjny, który jest najbliższy idealnemu wielościanowi.

Używane jest pierwszeństwo CIP.

**Schemat IR-9.1.** Schemat tworzenia nazw dla związków koordynacyjnych.

Schemat IR-9.1 zawiera ogólne reguły wykorzystywane w celu utworzenia nazwy danego związku koordynacyjnego. Reguły te zostały dokładniej omówione w wyszczególnionych Podrozdziałach, które zawierają również odpowiednie przykłady i wytyczne odnoszące się do poszczególnych reguł.

Nazwy niektórych związków mogą być na tyle długie, że ich stosowanie staje się niepraktyczne. W takich przypadkach lepszym rozwiązaniem jest posługiwanie się wzorem związku. Reguły tworzenia wzorów zostały uporządkowane w logiczny sposób, co ułatwia ich stosowanie. Należy jednak pamiętać, że wzory, ze względu na swoją skróconą formę, nie zawsze mogą przekazać tyle samo informacji o budowie związku co jego pełna nazwa.

## IR-9.2.2 Nazwy związków koordynacyjnych

Systematyczne nazwy jednostek koordynacyjnych uzyskuje się stosując zasady nomenklatury addytywnej, która przedstawiona została w Rozdziale IR-7. Tak więc nazwy grup otaczających atom centralny muszą zostać określone. Wymienia się je następnie jako przedrostki w nazwie atomu centralnego (Podrozdział IR-9.2.2.1) razem z odpowiednimi przedrostkami zwielokrotniającymi (Podrozdział IR-9.2.2.2). Przedrostki odnoszące się do nazw ligandów uzyskuje się w prosty sposób z ich nazw (Podrozdział IR-9.2.2.3). Nazwy anionowych jednostek koordynacyjnych (kompleksów anionowych) przybierają końcówkę „-an” lub „-ian”.

### IR-9.2.2.1 Kolejność nazw ligandów oraz atomów centralnych w nazwach związków koordynacyjnych

Nazywając związki koordynacyjne postępuje się zgodnie z następującymi regułami:

- (i) nazwy ligandów wymienia się przed nazwą atomu centralnego,
- (ii) między poszczególnymi składowymi odnoszącymi się do nazwy tej samej jednostki koordynacyjnej nie stawia się żadnych spacji
- (iii) nazwy ligandów wymienia się w porządku alfabetycznym (przy określaniu tej kolejności nie uwzględnia się przedrostków zwielokrotniających wskazujących liczbę danych ligandów)
- (iv) używanie nazw skróconych w nazwach jest niezalecane

Przykłady:

1.  $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}$   
chlerek pentaaminachloridokobaltu(2+)
2.  $[\text{AuXe}_4]^{2+}$   
tetraksenonidozłoto(2+)

Dodatkowe reguły mające zastosowanie dla związków wielordzeniowych omówiono w Podrozdziale IR-9.2.5.

### IR-9.2.2.2 Liczba ligandów w jednostce koordynacyjnej

Do wskazania liczby ligandów danego rodzaju w jednostce koordynacyjnej stosuje się dwa rodzaje przedrostków (Tabela IV).

- (i) Przedrostki di, tri, itd. są używane z nazwami prostych ligandów. W ich przypadku stosowanie nawiasów nie jest wymagane.
- (ii) Przedrostki bis, tris, tetrakis, itd. używane są z nazwami złożonych ligandów w celu uniknięcia niejednoznaczności. Nazwę, względem której stosuje się taki przedrostek, umieszcza się w nawiasie (układ nawiasów powinien być taki jaki opisano w Podrozdziale IR-2.2).

Na przykład można by użyć nazwy diamina dla  $(\text{NH}_3)_2$ , ale nazwa bis(metyloamina) pozwala na odróżnienie tego związku od dimetyloaminy. W takich nazwach jak tetraamina nie stosuje się elizji głosek oraz łącznika.

### IR-9.2.2.3 Używanie nazw ligandów

Systematyczne (oraz alternatywne) nazwy niektórych powszechnie znanych ligandów podano w Tabelach VII i XI. W Tabeli VII zawarto nazwy często spotykanych ligandów organicznych

podczas gdy w Tabeli IX zebrano nazwy prostych cząsteczek oraz jonów mogących występować jako ligandy. Ogólne zasady są następujące:

(i) Nazwy ligandów anionowych, zarówno nieorganicznych jak i organicznych, przekształca się w taki sposób, by kończyły się na „o”. Na ogół, jeżeli nazwa anionu kończy się na „ek”, to nazwę liganda tworzy się przez zastąpienie tej końcówki końcówką „o”. Jeżeli nazwa anionu kończy się na „id”(„yd”) lub „an” („ian”), nazwę liganda tworzy się przez dodanie „o” otrzymując w wyniku końcówki „ido” lub „ano” („iano”). W szczególności, do tej grupy należą alkoholany, tiolany, fenolany, karboksylazy, częściowo zdeprotonowane aminy, fosfany itd. Ligandy halogenkowe przyjmują nazwy fluorido, chlorido, bromido oraz jodido, koordynujący anion cyjankowy otrzymuje nazwę cyjanido.

W swoich jednostkach koordynacyjnych, za wyjątkiem takich w których obecny jest wodór cząsteczkowy, wodór traktowany jest zawsze jako anion. Dla koordynującego wodoru, w odniesieniu do wszystkich związków, stosuje się nazwę „hydrido”, włączając w to także związki boru.<sup>3</sup>

(ii) Nazwy ligandów kationowych oraz obojętnych, włączając ligandy organiczne<sup>4</sup>, używane są bez przekształceń (nawet, jeżeli posiadają końcówkę „id” („yd”) lub „an” („ian”)); przedstawione poniżej Przykłady 8 i 14).

(iii) Stosowanie nawiasów jest wymagane dla nazw ligandów kationowych oraz obojętnych, dla nazw ligandów anionowych zawierających przedrostki zwielokrotniające (tak jak w nazwie trifosforano), dla nazw opartych o nomenklaturę konstytucyjną, dla nazw podstawionych ligandów organicznych (nawet, jeżeli w ich użyciu nie ma żadnej niejednoznaczności), oraz w każdym przypadku, w którym konieczne jest uniknięcie niejednoznaczności. Stosowania nawiasów nie wymagają nazwy często spotykanych ligandów takie jak: akwa, amina, karbonyl, metyl, etyl, nitrozyl itd. chyba, że brak ich użycia wiąże się z powstaniem niejednoznaczności.

(iv) Ligandy, które wiążą się z atomem centralnym przez atomy węgla omówione zostały w Rozdziale IR-10 poświęconemu związkom organometalicznym.

Przykłady:

Wzór	Nazwa liganda
Cl <sup>-</sup>	chlorido
CN <sup>-</sup>	cyjanido
H <sup>-</sup>	hydrido <sup>3</sup>
D <sup>-</sup> lub 2H <sup>-</sup>	deuterido <sup>3</sup> lub [ <sup>2</sup> H]hydrido <sup>3</sup>
PhCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Se <sup>-</sup>	2-fenylotano-1-selenolano
MeCOO <sup>-</sup>	octano lub etaniano
Me <sub>2</sub> As <sup>-</sup>	dimetyloarsanido
MeCONH <sub>2</sub>	acetamid ( <i>nie</i> acetamido)
MeCONH <sup>-</sup>	acetyloamido lub acetyloazanido ( <i>nie</i> acetamido)
MeNH <sub>2</sub>	metanoamina
MeNH <sup>-</sup>	metyloamino, lub metyloazanido, lub metanoaminido (Przykład 3 Podrozdziału IR-6.4.6)
MePH <sub>2</sub>	metylofosfan
MePH <sup>-</sup>	metylofofanido
MeOS(O)OH	siarczyn metylowodorowy (metylowodorosiarczyn?)
MeOS(O)O <sup>-</sup>	metanolatodioksylosiarczyno, lub metanolatodioksylosiarczano(1-)



#### IR-9.2.2.4 Liczby ładunku, liczby utlenienia oraz stosunki stechiometryczne jonów

W celu opisu składu związku pomocne są następujące metody:

- (i) Stopień utlenienia atomu centralnego w jednostce koordynacyjnej wskazuje się za pomocą liczby pisanej cyframi rzymskimi. Liczbę tę umieszcza się w nawiasie oraz dołącza do nazwy atomu centralnego (włączając końcówki „an” oraz „ian”, jeżeli takie znajdują w danym przypadku zastosowanie), ale tylko wtedy, kiedy stopień utlenienia można wskazać bez żadnych niejednoznaczności. Jeżeli jest to konieczne, przed liczbą umieszcza się znak minus. Arabska cyfra zero wskazuje zerowy stopień utlenienia.
- (ii) Alternatywnie można wskazać ładunek jednostki koordynacyjnej. Zapisuje się go za pomocą liczb pisanych cyframi arabskimi, w kolejności najpierw liczba, a potem jej znak, zamknięte w nawiasie. Liczbę tę umieszcza się na końcu nazwy atomu centralnego (zachowując końcówki „an” oraz „ian”, jeżeli takie znajdują w danym przypadku zastosowanie) bez pozostawiania żadnej spacji.
- (iii) Stosunki stechiometryczne jonów w związku koordynacyjnym można podać stosując przedrostki zwielokrotniające (Podrozdział IR-5.4.2.1.).

Przykłady:

1.  $K_4[Fe(CN)_6]$   
heksacyjanożelazian(II) potasu, lub  
heksacyjanożelazian(4-) potasu, lub  
heksacyjanożelazian tetrapotasu
2.  $[Co(NH_3)_6]Cl_3$   
chlerek heksaaminakobaltu(III)
3.  $[CoCl(NH_3)_5]Cl_2$   
chlerek pentaaminachloridokobaltu(2+)
4.  $[CoCl(NH_3)_4(NO_2)]Cl$   
chlerek tetraaminachloridoazotano(III)\*-κN-kobaltu(III)
5.  $[PtCl(NH_2Me)(NH_3)_2]Cl$   
chlerek diaminachlorido(metanoamina)platyny(II)
6.  $[CuCl_2\{O=C(NH_2)_2\}_2]$   
dichloridobis(mocznik)miedź(II)
7.  $K_2[PdCl_4]$   
tetrachloridopalladan(II) potasu
8.  $K_2[OsCl_5N]$   
pentachloridonitridoosmian(2-) potasu
9.  $Na[PtBrCl(NH_3)(NO_2)]$   
Aminabromidochloridoazotano(III)-κN-platynian(1-) sodu

\*W pozycji *Red Book* z roku 2005 w nazwach związków koordynacyjnych występują człony „nitrito”, których polskim odpowiednikiem byłyby człony „azotyno”. Ze względu jednak na rozpowszechnienie użycia systemu Stocka w Polsce, użycie nazwy „azotyno” dla liganda  $NO_2^-$  nie jest zalecane.

11.  $[\text{Co}(\text{en})_3]\text{Cl}_3$  chlorek tris(etano-1,2-diamina)kobaltu(III)

### IR-9.2.3 Wzory związków koordynacyjnych

Wzór związku koordynacyjnego używany jest w celu dostarczenia podstawowych informacji na temat konstytucji związku w zwięzły i przejrzysty sposób. Różne zastosowania danego wzoru mogą wymagać elastyczności w jego zapisie. Z tego powodu, w niektórych przypadkach pożądane jest naruszenie wymienionych poniżej wytycznych, w celu zapewnienia dodatkowych informacji na temat struktury związku, których nie podaje jej wzór. W szczególności, w przypadku dwurdzeniowych związków koordynacyjnych wiele dodatkowych strukturalnych informacji może zostać podanych przez „rozluźnienie” zasad podanych w Podrozdziale IR-9.2.3.1 (Podrozdział IR-9.2.5, oraz, w szczególności, Podrozdział IR-9.2.5.5.).

#### IR-9.2.3.1 Kolejność symboli we wzorze związku koordynacyjnego

- (i) Atom / atomy centralne wymienia się jako pierwsze
- (ii) Symbole ligandów (wzory, nazwy skrócone lub akronimy) wymieniane są w kolejności alfabetycznej. Tak więc,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{MeCN}$  oraz  $\text{NCMe}$  będą uporządkowane wg odpowiadającej kolejności symboli C, M oraz N, oraz CO będzie występowało przed Cl jako że symbole jednoliterowe mają pierwszeństwo względem dwuliterowych. Pozycja liganda nie zależy od jego ładunku.
- (iii) Więcej informacji przekazuje się przedstawiając wzór liganda tak, aby jego atom donorowy był najbliżej jonu centralnego. Sposób ten jest zalecany w każdym możliwym do zastosowania przypadku, także dla koordynujących cząsteczek wody.

#### IR-9.2.3.2 Stosowanie nawiasów

Wzór całej jednostki koordynacyjnej, niezależnie od tego czy posiada ona jakiś ładunek czy nie, umieszcza się w nawiasie kwadratowym. Jeżeli ligandy są wieloatomowe, ich wzory zamyka się w nawiasach okrągłych. Skróty nazw ligandów także zazwyczaj zamyka się w nawiasach okrągłych. Uwagi dotyczące gniazdowego użycia nawiasów podane zostały w Podrozdziałach IR-2.2 oraz IR-4.2.3. Nawiasy kwadratowe używane są tylko do umieszczania w nich jednostek koordynacyjnych, nawiasy okrągłe oraz klamrowe używane są na przemian. Użycie nawiasów zilustrowane zostały w przykładach 1-11 w Podrozdziale IR-9.2.2.4. Należy zwrócić uwagę na brak odstępów pomiędzy symbolami lub wzorami poszczególnych jonów.

#### IR-9.2.3.3 Ładunki jonów oraz stopnie utlenienia

Jeżeli podaje się wzór jonu koordynacyjnego bez towarzyszącego mu przeciwjonu, to ładunek jonu pisze się na zewnątrz nawiasu kwadratowego jako prawy górny wskaźnik, z liczbą przed znakiem. Stopień utlenienia atomu centralnego można wskazać za pomocą liczby pisanej cyframi rzymskimi jako prawy górny wskaźnik przy symbolu danego pierwiastka.

Przykłady:

1.  $[\text{PtCl}_6]^{2-}$
2.  $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$
3.  $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{NCS})_4(\text{NH}_3)_2]^-$

4.  $[\text{Cr}^{\text{III}}\text{Cl}_3(\text{H}_2\text{O})_3]$
5.  $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CO})_4]^{2-}$

#### IR-9.2.3.4 Stosowanie skrótów

Skróty, we wzorach związków koordynacyjnych, mogą być stosowane dla złożonych ligandów organicznych (w nazwach jednak nie powinny być używane). Kiedy używa się ich we wzorach zazwyczaj umieszczane są w nawiasach okrągłych.

Odpowiednie wytyczne dla tworzenia skrótów ligandów podane są w Podrozdziale IR-4.4.4; przykłady skrótów wyszczególniono w porządku alfabetycznym w Tabeli VII. Odpowiednie schematy struktur dla większości związków przedstawiono w Tabeli VIII.

W przypadkach, w których koordynowanie następuje przez jedno z kilku możliwych atomów donorowych danego liganda, konieczne może być wskazanie koordynującego atomu. Osiągnięte jest to przez użycie konwencji kappa (Podrozdział IR-9.2.4.2) w którym grecka mała litera kappa ( $\kappa$ ) używana jest do wskazania atomu donorowego. W pewnym stopniu, konwencja ta może być również używana w zapisie wzorów związków. Na przykład, kiedy anion glicyny (gly) koordynuje tylko przez atom azotu, ligand zostanie zapisany w postaci skrótu jako gly- $\kappa\text{N}$ , tak jak w przypadku jednostki koordynacyjnej  $[\text{M}(\text{gly-}\kappa\text{N})_3\text{X}_3]$ .

#### IR-9.2.4 Określanie atomów donorowych

##### IR-9.2.4.1 Wiadomości ogólne

Nie ma konieczności określania atomu donorowego liganda, który posiada tylko jeden atom zdolny do utworzenia wiązania z atomem centralnym. Jednakże, niejednoznaczności mogą się pojawić jeżeli ligand posiada więcej niż jeden taki atom. Konieczne jest wtedy wskazanie, który atom (bądź atomy) donorowy danego liganda tworzy wiązanie z atomem centralnym. Obejmuje to przypadki w których ligand może być postrzegany jako indywiduum utworzone przez usunięcie jonu  $\text{H}^+$  z odpowiedniego miejsca cząsteczki bądź jonu. Na przykład, acetyloacetonian,  $\text{MeCOCHCOMe}^-$ , traktowany jako ligand posiada systematyczną nazwę 2,4-dioksopentan-3-ido, która nie wskazuje na tworzenie wiązania z atomem centralnym przez centralny atom węgla w cząsteczce liganda. Atom donorowy może zostać wskazany tak jak to pokazano w Podrozdziale IR-9.2.4.2.

Jedynymi przypadkami, w których wskazywanie atomu donorowego nie jest konieczne dla ligandów mogących tworzyć wiązanie z atomem centralnym w różny sposób są:

monodentne O-donorowe grupy karboksylanowe

monodentny C-donorowy cyjanek (nazwa liganda „cyjanido”)

monodentny C-donorowy monotlenek węgla (nazwa liganda „karbonyl”)

monodentny N-donorowy monotlenek azotu (nazwa liganda „nitrozyl”)

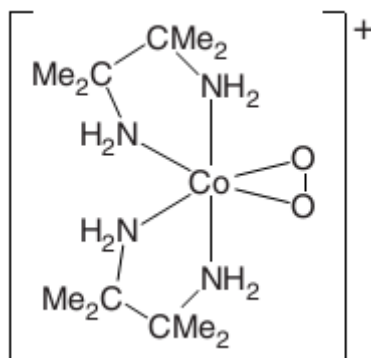
Przez konwencję, w tych przypadkach nazwy ligandów wskazują na sposób jego koordynacji. Kolejne podrozdziały szczegółowo opisują sposoby służące wskazaniu atomów donorowych. Konwencja kappa ( $\kappa$ ), wprowadzona w Podrozdziale IR-9.2.4.2, jest ogólna i może być stosowana nawet dla bardzo złożonych układów. W niektórych przypadkach może zostać uproszczona do użycia tylko samych symboli atomów donorowych (Podrozdział IR-9.2.4.4).

Systemy te mogą być używane w nazwach, nie zawsze jednak są odpowiednie do zastosowania we wzorach związków. Użycie symboli atomów donorowych jest możliwe w przypadku wzorów prostych układów (Podrozdział IR-9.2.3.4), jednakże, aby uniknąć niejednoznaczności, wskazane jest zachowanie ostrożności. Konwencja kappa nie jest ogólnie zgodna z użyciem skrótów nazw ligandów.

Metody te są z reguły używane tylko w celu wyszczególnienia wiązania pomiędzy atomem centralnym a izolowanymi atomami donorowymi. W przypadkach, w których atom centralny związany jest z przyległymi względem siebie atomami donorowymi tego samego liganda używana jest konwencja eta ( $\eta$ ) (Podrozdział IR-10.2.5.1). Dla większości przypadków dotyczy to związków organometalicznych (Rozdział IR-10), poniższy przykład jednak ilustruje jej użycie dla związków koordynacyjnych.

Przykład:

1.



bis(2,3-dimetylobutano-2,3-diamina)( $\eta^2$ -peroksido)kobalt(1+)

#### IR-9.2.4.2 Konwencja kappa

Pojedyncze koordynujące (donorowe) atomy liganda wskazuje się za pomocą pisanego kursywą symbolu pierwiastka, poprzedzonego grecką literą kappa ( $\kappa$ ). Symbole te umieszcza się za częścią nazwy liganda, która odnosi się do pierścienia, łańcucha bądź grupy podstawnikowej w której obecny jest dany atom donorowy.

Przykład:

1.  $[\text{NiBr}_2(\text{Me}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PMe}_2)]$   
dibromido[etano-1,2-diylobis(dimetylofosfan- $\kappa P$ )]nikiel(II)

Przedrostki zwielokrotniające, które stosuje się względem liganda lub jego części, stosuje się również w przypadku symboli atomów donorowych. W niektórych przypadkach wymaga to użycia alternatywnej nazwa liganda, np. kiedy przedrostki zwielokrotniające nie mogą zostać użyte z powodu innego sposobu koordynacji tego samego liganda. Przykłady tego typu zostały przedstawione poniżej.

Prostym przykładem jest ligand NCS. Ligand ten koordynujący przez atom azotu zaznacza się jako tiocyjaniano- $\kappa N$ , a koordynujący przez atom siarki jak tiocyjaniano- $\kappa S$ . Azotan(III) związany przez atom azotu nazywa się azotano(III)- $\kappa N$ , a związany przez atom tlenu azotano(III)- $\kappa O$ , np. pentaaminaazotano(III)- $\kappa O$ -kobalt(III).

Dla ligandów posiadających kilka atomów donorowych, znajdujących się wzdłuż wyszczególnionego łańcucha, porządek symboli  $\kappa$  powinien być taki sam jak kolejność danych atomów donorowych w wyszczególnionym łańcuchu, rozpoczynając od jednego z końców tego łańcucha. Wybór końca danego łańcucha zależy od porządku alfabetycznego atomów donorowych, jeżeli są one różne, np. cysteiniano- $\kappa N, \kappa S$ ; cysteiniano- $\kappa N, \kappa O$ .

Atomy donorowe tego samego pierwiastka mogą być rozróżnione przez dodanie lokanta liczbowego, umieszczanego w postaci prawego indeksu górnego symbolu pierwiastka. Symbol pierwiastka pisany jest wówczas kursywą. W prostych przypadkach (takich jak podano w

poniższym Przykładzie 3), zamiast lokantów liczbowych stosuje się symbole takie jak prim (') lub podwójne prim (").

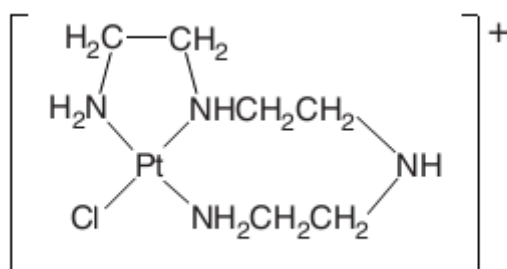
Lokanty liczbowe w postaci indeksów górnych oparte są na odpowiednim sposobie numeracji wszystkich lub tylko niektórych atomów liganda, tak jak numerowanie atomów w szkielecie macierzystych wodorków. Sposób ten pozwala wskazać miejsca wiązań z danym atomem centralnym nawet w bardzo złożonych przypadkach. W prostym przypadku, którym może być acetyloaceton,  $\text{MeCOCHCOMe}^-$ , nazwa liganda 2,4-dioksopentano-3-ido- $\kappa\text{C}^3$  wskazuje na jego koordynowanie przez centralny atom węgla w szkielecie pentanu (Przykład 4 poniżej).

W pewnych przypadkach, standardowe zasady stosowane w nomenklaturze nie pozwalają w jednoznaczny sposób określić lokantów dla atomów donorowych. Znajdują wówczas zastosowanie metody doraźne. Np. dla liganda  $(\text{CF}_3\text{COCHCOMe})^-$ , nazwa 1,1,1-trifluoro-2,4-dioksopentano-3-ido- $\kappa\text{O}$  mogłaby być użyta by zaznaczyć koordynowanie tego liganda przez atom tlenu części  $\text{CF}_3\text{CO}$ , podczas gdy koordynowanie przez  $\text{MeCO}$  zostałoby zaznaczone przez nazwę 1,1,1-trifluoro-2,4-dioksopentano-3-ido- $\kappa\text{O}'$ . Użycie symbolu prim wskazuje, że atom tlenu  $\text{MeCO}$  powiązany jest z wyższym lokantem w cząsteczce niż atom tlenu  $\text{CF}_3\text{CO}$ . Atom tlenu części  $\text{CF}_3\text{CO}$  związany jest z atomem C2, podczas gdy atom tlenu części  $\text{MeCO}$  związany jest z atomem C4. W alternatywny sposób, nazwa mogłaby zostać zmodyfikowana do nazwy 1,1,1-trifluoro-2-(okso- $\kappa\text{O}$ )-4-oksopentano-3-ido oraz 1,1,1-trifluoro-2-okso-4-(Okso- $\kappa\text{O}$ )pentano-3-ido, odpowiednio dla dwóch różnych sposobów koordynowania.

W układach, w których koordynują dwa bądź więcej takich samych ligandów (albo części ligandów polidentnych), do symbolu  $\kappa$  po prawej stronie dodaje się w postaci indeksu górnego wskaźnik liczbowy określający liczbę koordynujących atomów donorowych. Tak jak wspomniano wyżej, przedrostki zwielokrotniające odnoszące się do jednostek koordynacyjnych stosuje się również do wskaźnika  $\kappa$ . Tak więc, w przytoczonym poniżej Przykładzie 2 stosuje się fragment nazwy „...bis(2-amino- $\kappa\text{N}$ -etylo...”, a nie „bis(2-amino- $\kappa^2\text{N}$ -etylo)...”. W celu zobrazowania użycia tych reguł podano Przykłady 2 oraz 3, które dotyczą tridentnego (trójkleszczowego) chelatowania przez liniowy ligand tetraaminowy  $N,N'$ -bis(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina.

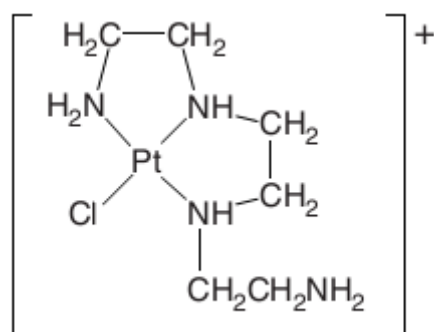
Przykłady:

2.



[ $N,N'$ -bis(2-amino- $\kappa\text{N}$ -etylo)etano-1,2-diamina- $\kappa\text{N}$ ]chloridoplatyna(II)

3.



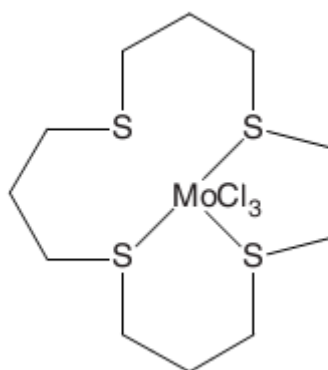
[*N*-(2-amino- $\kappa N$ -etylo)-*N'*-(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina- $\kappa^2 NN'$ ] chloridoplatyna(II)

W Przykładzie 2 koordynacja liganda przez dwie terminalne grupy aminy pierwszorzędowej wskazana jest przez umieszczenie wskaźnika kapp (κ) po nazwie przedrostka grupy podstawnikowej, a podwojenie wskazuje się przez użycie przedrostka bis-, który poprzedza to wyrażenie. Pojawienie się pojedynczego wskaźnika  $\kappa N$  po słowie etano-1,2-diamina wskazuje na wiązanie tylko przez jeden atom z dwu równoważnych atomów azotu aminy drugorzędowej. W Przykładzie 3 koordynowana jest tylko jedna z pierwszorzędowych amin, co uwidocznione jest brakiem przedrostka bis i dwukrotnym zapisem (2-aminoetylo), przy czym wskaźnik  $\kappa$  wprowadza się tylko do pierwszego zapisu tj. (2-amino- $\kappa N$ -etylo). Udział w wiązaniu chelatowym obydwu atomów azotu drugorzędowej etano-diaminy wskazuje się za pomocą indeksu  $\kappa^2 N, N'$ .

Chelatacja tridentna przez czterofunkcyjny związek makrocykliczny przedstawiona jest w sposób jednoznaczny za pomocą wskaźnika  $\kappa$  następującego po nazwie. Aby rozróżnić daną jednostkę koordynacyjną od innych, w których atom centralny może być związany z atomami donorowymi w inny sposób, konieczne jest podanie lokantów.

Przykład:

4.



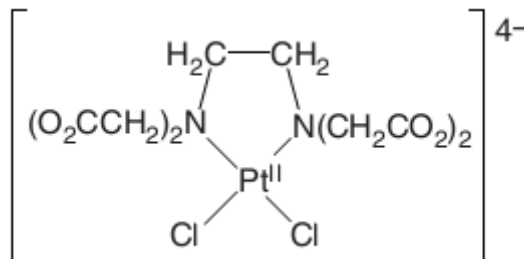
trichlorido(1,4,8,12-tetratiacyklopentadekan- $\kappa^3 S^{1,3,8}$ )molibden, lub  
trichlorido(1,4,8,12-tetratiacyklopentadekan- $\kappa^3 S^1, S^4, S^8$ )molibden

Przykłady 5, 6 oraz 7 ilustrują dobrze znane sposoby koordynowania (etano-1,2-diyłodinitrylo)tetraoctanu, który może być ligandem didentnym, tetradentnym oraz pentadentnym. W celu uniknięcia niejednoznaczności, która część danego octanu koordynuje do atomu centralnego, przedrostek 'tetra' użyty w Przykładzie 5 nie może być użyty w Przykładach 6 i 7. W takich przypadkach, nazwy koordynujących fragmentów podaje się przed nazwami fragmentów niekoordynujących. Alternatywnie, można użyć nazwy zmodyfikowanej, tak jak ilustruje to Przykład 7, w którym to przedstawione jest użycie zalecanej przez IUPAC

nazwy *N,N'*-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyna] (Podrozdział P-44.4 pozycji podanej w Odnośniku 1).

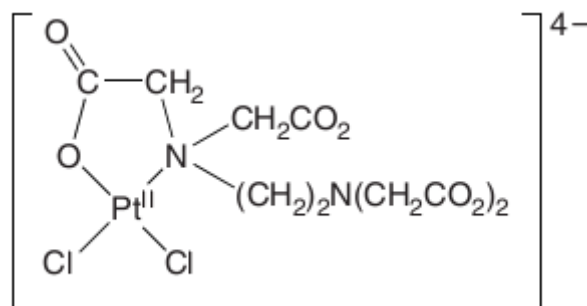
Przykłady:

5.



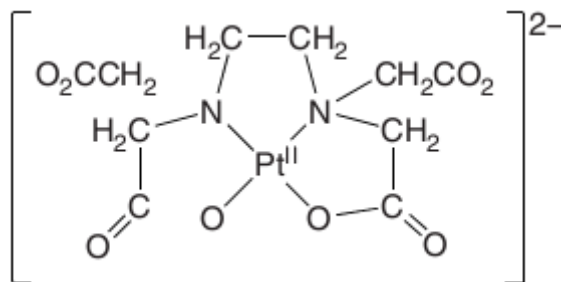
dichlorido[(etano-1,2-diylodinitrilo- $\kappa^2 N,N'$ )tetraoctano]platynian(4-)

6.



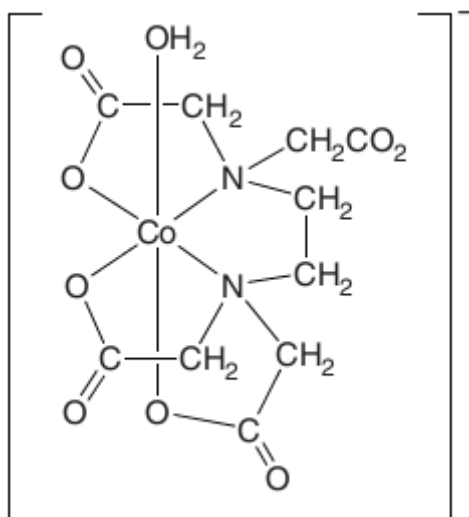
dichlorido[(etano-1,2-diylodinitrilo- $\kappa N$ )(octano- $\kappa O$ )trioctatno]platynian(II)

7.



[(etano-1,2-diylodinitrilo- $\kappa^2 N,N'$ )(*N,N'*-dioctano- $\kappa^2 O,O'$ )(*N,N'*-dioctatno)]platynian(2-), lub  
 {*N,N'*-etano-1,2-diylobis[*N*-(karboksymetylo)glicyniano-  $\kappa O, \kappa N$ ]}platynian(2-)

8.



akwa[(etano-1,2-diylo-dinitrylo- $\kappa^2$ - $N,N'$ )tris(octano- $\kappa O$ )octano]kobaltan(1-),  
lub akwa[ $N$ -{bis(karboksylo- $\kappa O$ -metylo)amino- $\kappa$ -]etylo}- $N$ -(karboksylo- $\kappa O$ -  
metylo)glicyniano- $\kappa$ -]kobaltan(1-)

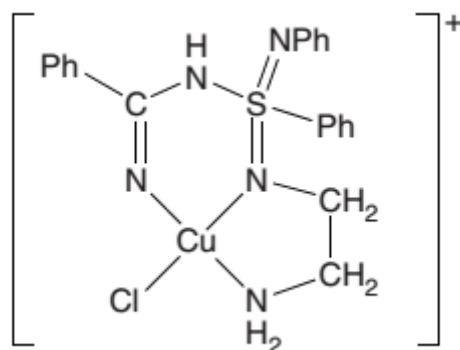
Związek edta w którym jedna grupa aminowa i wszystkie cztery grupy karboksylowe są związane z tym samym jonem metalu nosiłby nazwę liganda (etano-1,2-diylo-dinitrylo- $\kappa N$ )tetrakis(octano- $\kappa O$ ) w nazwie jednostki koordynacyjnej.

Mieszany siarkowo-tlenowy cykliczny polieter 1,7-13-trioksa-4,10,16-tritiacyklooktadekan, może tworzyć chelaty z metalami alkalicznymi tylko przez atomy tlenu, a z atomami pierwiastków drugiego szeregu przejściowego tylko przez atomy siarki. Odpowiednie wskaźniki kappa dla takiej chelatowej jednostki koordynacyjnej byłyby wówczas następujące  $\kappa^3 O^1, O^7, O^{13}$  i  $\kappa^3 S^4, S^{10}, S^{16}$ .

Przykłady 9-11 ilustrują trzy sposoby chelatowania liganda  $N$ -[ $N$ -(2-aminoetylo)- $N'$ - $S$ -difenilosulfonodiimidoil]benzamidyna. Pomimo obecności licznych, mogących koordynować, heteroatomów w strukturze liganda, wymienione sposoby koordynowania (oraz inne) mogą być rozróżnione poprzez zastosowanie wskaźników kappa.

Przykłady:

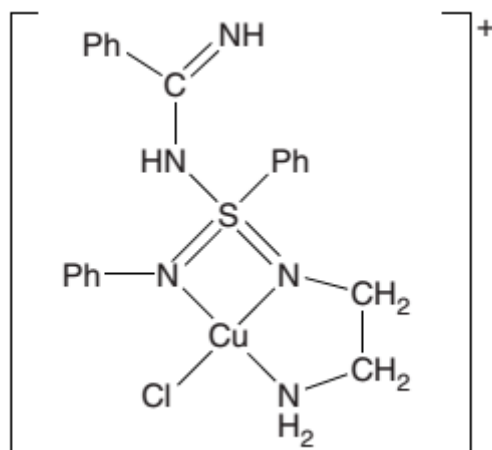
9.



{ $N$ -[ $N$ -(2-amino- $\kappa N$ -etylo)- $N'$ , $S$ -difenilosulfonodiimidoilo- $\kappa N$ ]-benzamidyna-  
 $\kappa N$ }chloridomiedź(II)

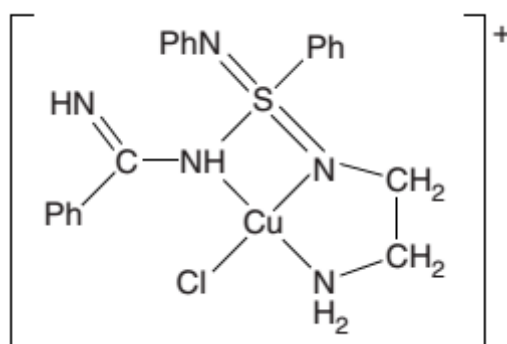


10.



{*N*-[*N*-(2-amino- $\kappa$ *N*-etylo)-*N*',*S*-difenylosulfonodiimidoilo- $\kappa^2$ *N,N'*]*N*]benzamidyna}chloridomiedź(II)

11.



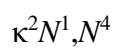
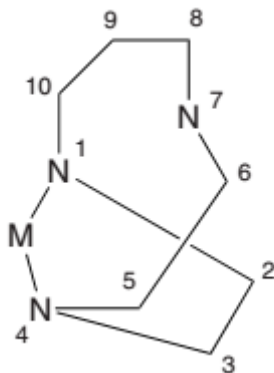
{*N*-[*N*-(2-amino- $\kappa$ *N*-etylo)-*N*',*S*-difenylosulfonodiimidoilo- $\kappa$ *N*]benzamidyna- $\kappa$ *N*}chloridomiedź(II)

Rozróżnienie nazw podanych w Przykładach 9 oraz 11 opiera się na umownym oznaczeniu znakiem „prim” iminowego atomu azotu w benzamidynowej grupie funkcyjnej. Znak ten odróżnia iminowy atom azotu grupy benzamidynowej od podstawionego atomu azotu (niebędącego oznaczonym za pomocą znaku „prim”, który występuje na początku nazwy). Zastosowanie lokantów dla atomów donorowych przy symbolach atomów w celu wskazania atomów koordynujących zostało zilustrowane za pomocą dwóch izomerycznych sposobów wiązania liganda makrocyklicznego 1,4,7-triazacyklodekanu (Przykłady 12 oraz 13). Zaznaczenie utworzenia pierścienia pięcioczłonowego wymaga zastosowania wskaźnika  $\kappa^2N^1,N^4$ , natomiast opis sposobu koordynacji z utworzeniem pierścienia sześcioczłonowego

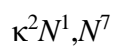
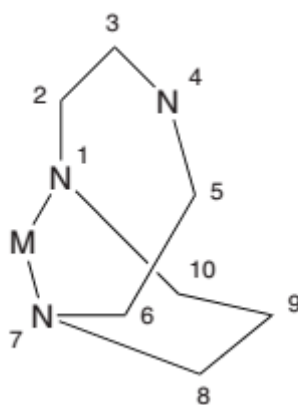
wymaga wskaźnika  $\kappa^2N^1,N^7$ . Przykład 14 ilustruje możliwość kilkukrotnego pojawienia się użytych wraz z literą kappa tych samych lokantów oraz symboli atomów, odnoszących się do różnych części danego liganda.

Przykłady:

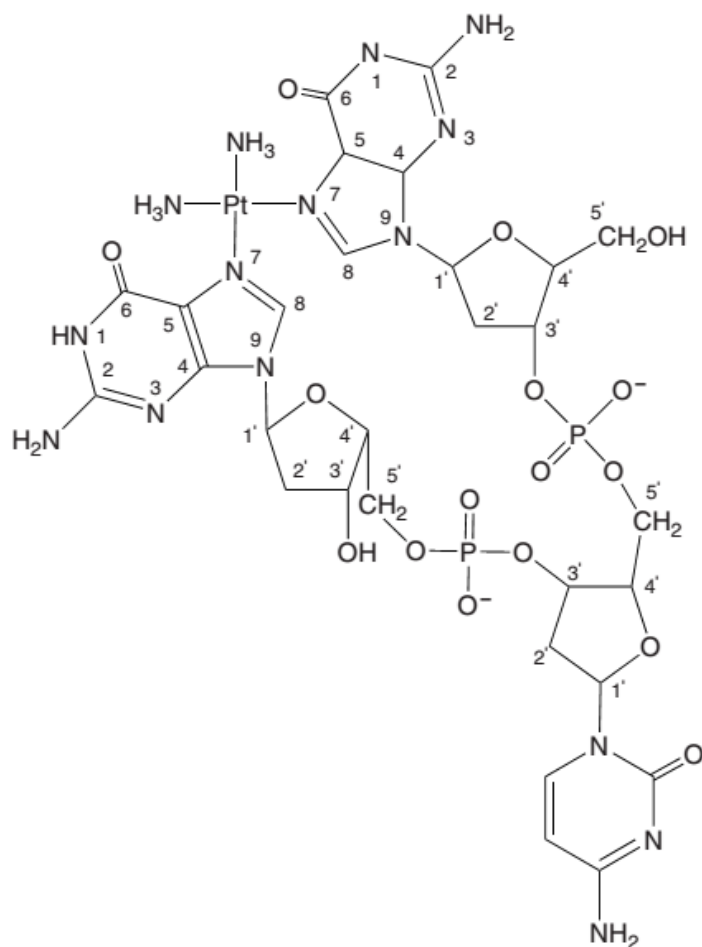
12.



13.



14.



*diamina-[2'-deoksyguanylylo-κN<sup>7</sup>-(3'->5')-2'-deoksytydylylo(3'->5')-2'-deoksyguanozyniano(2-)-κN<sup>7</sup>]-platyna(II)*

#### IR-9.2.4.3 Porównanie konwencji eta oraz kappa

Konwencja eta (Podrozdział IR-10.2.5.1) stosowana jest w przypadkach w których sąsiadujące donorowe atomy danego liganda tworzą wiązania z atomem centralnym. Z tego powodu, używana jest tylko gdy istnieje więcej niż jeden koordynujący atom – oznaczenia  $\eta^1$  nie stosuje się. Sąsiadujące atomy często są atomami tego samego pierwiastka, jednak nie muszą nimi być. Konwencja kappa używana jest w celu zaznaczenia tworzenia wiązania przez pojedyncze atomy donorowe do jednego lub większej liczby atomów centralnych.

W przypadkach w których dwa lub więcej tych samych ligandów (lub części liganda polidentnego) tworzy wiązania z atomem centralnym, litery  $\kappa$  używa się wraz z górnym wskaźnikiem wskazującym liczbę wiązań utworzonych między atomami donorowymi a atomem centralnym.

#### IR-9.2.4.4 Użycie wyłącznie symboli atomów donorowych w nazwach

W pewnych przypadkach konwencja kappa może zostać uproszczona. Donorowe atomy liganda mogą być wyszczególnione tylko przez zapisanie kursywą ich symbolu/symboli, umieszczonych na końcu nazwy danego liganda. Stąd, anion 1,2-ditioszczawianowy, dla

którego stosowane nazwy takie jak 1,2-ditioszczawiano- $\kappa S, \kappa S'$  i 1,2-ditioszczawiano- $\kappa O, \kappa S$ , bez możliwości wystąpienia jakichkolwiek niejednoznaczności, mogą zostać skrócone odpowiednio do 1,2-ditioszczawiano- $S, S'$  i 1,2-ditioszczawiano- $O, S$ . Innymi przykładami są tiocyjaniano- $N$ , tiocyjaniano- $S$ , azotyno- $N$  oraz azotyno- $O$ .

## IR-9.2.5 Wielordzeniowe związki koordynacyjne

### IR-9.2.5.1 Wiadomości ogólne

Wielojądrowe nieorganiczne jednostki koordynacyjne występują w różnorodnych typach strukturalnych, takich jak jonowe ciała stałe, polimery cząsteczkowe, duże ugrupowania anionów tlenowych, łańcuchy oraz pierścienie, związki koordynacyjne metali połączone „mostkami” oraz homojądrowe i heterojądrowe klastery. Poniższy rozdział obejmuje głównie nomenklaturę mostkowych związków koordynacyjnych oraz homojądrowych i heterojądrowych klasterów. Nomenklatura polimerów koordynacyjnych została szeroko omówiona w innym opracowaniu.<sup>6</sup>

Ogólną zasadą przy zapisywaniu nazwy związku wielordzeniowego jest dostarczenie największej możliwej ilości informacji na temat jego struktury. Jednakże, struktury wielojądrowych jednostek koordynacyjnych mogą być tak rozbudowane, że racjonalna nomenklatura oparta na strukturze staje się niepraktyczna. Co więcej, struktury tych związków mogą być nieznanne bądź niedokładnie poznane. W takich przypadkach najbardziej odpowiednia jest nomenklatura stechiometryczna, która ujmuje stosunki stechiometryczne różnych obecnych ugrupowań strukturalnych.

W obecnym oraz następnym podrozdziałach, dane jednostki koordynacyjne są wielokrotnie wykorzystywane jako przykłady w celu zobrazowania ich różnego sposobu nazewnictwa, zgodnie z potrzebą zawarcia tylko stosunków stechiometrycznych danych ugrupowań bądź częściową lub pełną informacją o strukturze związku.

W nazwach oraz wzorach wielojądrowych jednostek koordynacyjnych ligandy wymienia się w zwykłym porządku alfabetycznym. Liczba każdego z ligandów podawana jest w postaci przedrostka zwielokrotniającego zapisywanego w indeksie dolnym we wzorach związków (Podrozdziały IR-9.2.3.1 – IR-9.2.3.4) i za pomocą odpowiedniego przedrostka zwielokrotniającego w nazwach (Podrozdziały IR-9.2.2.1 – IR-9.2.2.3). Liczba atomów centralnych danego rodzaju, jeżeli jest większa niż 1, podawana jest w podobny sposób.

Należy zwrócić uwagę na możliwość „rozluźnienia” wymienionych wyżej reguł, jeżeli istnieje potrzeba jednoznacznego przedstawienia pewnych cech strukturalnych danego związku. Wykorzystanie tej elastyczności zilustrowano zostało w poniższych przykładach:

Przykład:

1.  $[\text{Rh}_3\text{H}_3[\text{P}(\text{OMe})_3]_6]$   
trihydridoheksakis(trimetylofosforyno)trirod, lub  
trihydridokesakis(trimetylofosforano(III))trirod

Jeżeli można wyróżnić więcej niż jeden atom centralny, ich symbole wymienia się w porządku przedstawionym w Tabeli VI. Im później symbol danego pierwiastka pojawia się w kolejności przedstawionej w Tabeli VI, tym wcześniej jego symbol, względem symboli pozostałych atomów centralnych, podaje się we wzorze związku koordynacyjnego. Ta sama reguła dotyczy również podawania nazw atomów centralnych w nazwach związków koordynacyjnych.

Przykład:

2. [ReCo(CO)<sub>9</sub>]  
nonakarbonylokobaltren

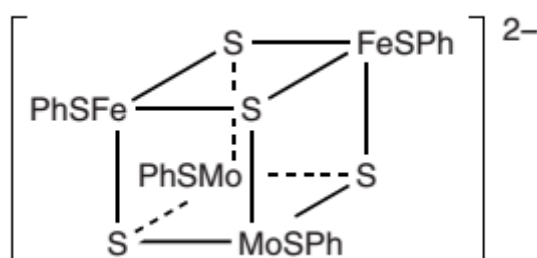
Dla substancji anionowych przyrostek „an” („ian”) i liczbę wskazującą ładunek jonu (Podrozdział IR-5.4.2.2) dodaje się po nazwach atomów centralnych, które wówczas zamknięte są w nawiasach jeżeli występuje więcej niż jeden rodzaj pierwiastka.

Przykłady:

3. [Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>]<sup>2-</sup> heptaoksidodichromian(2-)

4. [Re<sub>2</sub>Br<sub>8</sub>]<sup>2-</sup> oktabromidorenian(2-)

5. [Mo<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>S<sub>4</sub>(SPh)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>



tetrakis(benzenotriolano)tetrakis(sulfido)(dimolibendizelazo)an(2-)

Chociaż nie zilustrowano tego wieloma przykładami to należy wspomnieć, że przedstawione powyżej zasady mają zastosowanie także do związków koordynacyjnych, których atomy centralne nie są metalami.

Przykład:

6. [PSO<sub>7</sub>]<sup>2-</sup> heptaoksido(fosforsiaraka)an(2-)

Analogiczne nazwy nadawane są wielu kwasom tlenowym oraz związkom pochodnym (Rozdział IR-8 oraz Tabela IX).

Symbol kappa, κ, wprowadzony został w Podrozdziale IR-9.2.4.2, w celu wyszczególnienia koordynujących atomów w ligandach wieloatomowych. Symbolu tego używa się również dla takich ligandów występujących w związkach wielojądrowych. Jednakże, symbol ten pełni wówczas inną funkcję, mianowicie wyszczególnia, który z koordynujących atomów wiąże się z danym atomem centralnym. Wymaga to przypisania atom centralnym liczb wg porządku w którym atomy te występuje na liście atomów centralnych (im później symbol danego atomu pojawia się w Tabeli VI, tym niższa liczba jest do niego przypisana).

Jeżeli występuje więcej niż jeden atom centralny tego samego pierwiastka wymagane jest stosowanie dodatkowych reguł (Podrozdziały IR-9.2.5.5 orz IR-9.2.5.6), za wyjątkiem obecności elementów symetrii w strukturach związków, które dwa lub więcej atomów centralnych sprowadzają do atomów symetrycznie ekwiwalentnych (na przykład Podrozdział IR-9.2.5.4) i ostatecznie otrzymywana nazwa jest niezależna od porządku liczbowego.

Liczby przypisane atomom centralnym są następnie używane jako lokanty dla atomów koordynujących i umieszczane są z lewej strony każdego symbolu kappa. Poszczególne symbole kappa z liczbowymi wskaźnikami w postaci indeksu górnego (jeżeli ich zastosowanie

jest konieczne), lokanty atomów centralnych oraz symbole atomów koordynujących, rozdziela się przy użyciu przecinków.

Przykłady:

7.  $[(OC)_5ReCo(CO)_4]$   
nanokarbonylo-1 $\kappa^5C$ ,2 $\kappa^4C$ -renkobalt

8.  $[Cl_4ReReCl_4]^{2-}$   
oktachlorido-1 $\kappa^4Cl$ ,2 $\kappa^4Cl$ -direnian(2-)

W powyższych dwóch przykładach, informacja o strukturze związków podana za pomocą wzorów nie jest zawarta w ich nazwach. W zasadzie, jakkolwiek wielordzeniowy związek koordynacyjny musi zawierać albo co najmniej jeden ligand koordynujący do więcej niż jednego atomu centralnego (ligand mostkowy) albo zawierać wiązanie między dwoma atomami centralnymi. W celu wyszczególnienia tych aspektów strukturalnych w nazwach, wymagane są kolejne „narzędzia”. Zostały one omówione w dwóch następnych podrozdziałach.

### IR-9.2.5.2 Ligandy mostkowe

Ligandy mostkowe, jeżeli można je wyszczególnić, oznaczane są za pomocą greckiej litery  $\mu$ , która umieszczana jest przed symbolem liganda lub jego nazwą. Między symbolem/nazwą liganda a literą  $\mu$  umieszcza się łącznik. Konwencja ta została krótko przedstawiona w Podrozdziale IR-9.1.2.10. W nazwach, cały człon, np.  $\mu$ -chlorido, oddzielony jest od reszty nazwy za pomocą łączników, np. amina- $\mu$ -chlorido-chlorido, itd., lub, w przypadku obecności bardziej skomplikowanych ligandów, nawiasami. Jeżeli ligand mostkowy występuje więcej razy to stosuje się przedrostki zwielokrotniające, jak np. tri- $\mu$ -chlorido-chlorido lub dla bardziej złożonych ligandów bis( $\mu$ -difenylfosfido).

Ligandy mostkowe wymienia się w porządku alfabetycznym wraz z innymi ligandami, ale dany ligand mostkowy podaje się przed jego odpowiednikiem niemoistkowym, np. di- $\mu$ -chlorido-tetrachlorido. We wzorach związków koordynacyjnych, ligandy mostkowe umieszcza się po ligandach terminalnych tego samego rodzaju. Z tego powodu, zarówno w nazwach jak i wzorach związków koordynacyjnych ligandy mostkowe znajdują się dalej od atomów centralnych niż ligandy terminalne tego samego rodzaju.

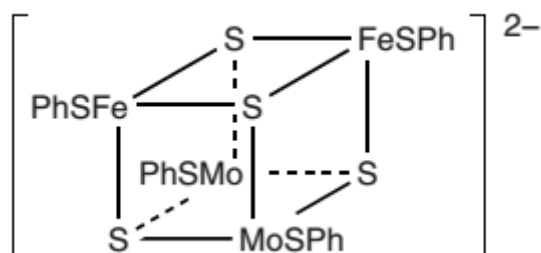
Przykład:

1.  $[Cr_2O_6(\mu-O)]^{2-}$   $\mu$ -oksydo-heksaoksydodichromian(2-)

Krotność mostka (n), tj. liczba centrów koordynacyjnych połączonych przez dany ligand mostkowy, podawana jest po prawej stronie u dołu symbolu  $\mu$ . Krotność mostka 2 jest na ogół pomijana. Wielokrotne mostki wymienia się w kolejności malejącej złożoności, jak np.  $\mu_3$ -oksydo-di- $\mu$ -oksydo-trioksydo. W przypadku ligandów wymagających stosowania nawiasów, znak  $\mu$  jest zawarty wewnątrz tych nawiasów.

W razie potrzeby, celem wskazania przez które atomy donorowe związane są dane atomy centralne, razem z symbolami  $\mu$  używana jest konwencja kappa. Wskaźnik kappa uwzględnia wszystkie wiązania atom donorowy – atom centralny więc np. w poniższym Przykładzie 2, wskaźnik 1:2:3 $\kappa^3S$  wyszczególnia wszystkie trzy wiązania tworzone przez atom siarki mostkujący atomy centralne 1, 2 oraz 3.

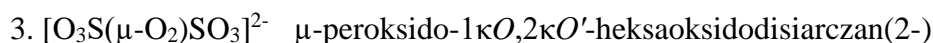
Przykład:



tetrakis(benzenotiolano)-1 $\kappa$ S,2 $\kappa$ S,3 $\kappa$ S,4 $\kappa$ S-tetra- $\mu_3$ -sulfido-  
1:2:3 $\kappa^3$ S;1:2:4 $\kappa^3$ S;1:3:4 $\kappa^3$ S;2:3:4 $\kappa^3$ S-(dimolibdendiżelazo)an(2-)

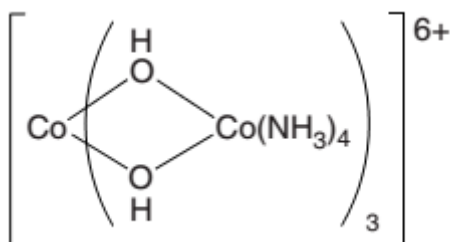
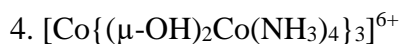
W powyższym przykładzie dwa atomy molibdenu ponumerowano jako 1 i 2, a dwa atomy żelaza jako 3 i 4, zgodnie z regułami przedstawiony w Podrozdziale IR-9.2.5.1. Z powodu występujących elementów symetrii nie jest konieczne rozróżnianie atomu 1 od atomu 2 oraz atomu 3 od atomu 4.

Przykład:



Jeżeli pojedyncze atomy koordynujące wiążą się z jednym lub większą liczbą atomów centralnych, lokanty atomu centralnego rozdzielane są za pomocą dwukropka. Na przykład, nazwa tri- $\mu$ -chlorido-1:2 $\kappa^2$ Cl;1:3 $\kappa^2$ Cl;3 $\kappa^2$ Cl- wskazuje na obecność trzech ligandów mostkowych w postaci jonów chlorkowych, które mostkują atomy centralne 1 i 2, 1 i 3 oraz 2 i 3. Należy zauważyć, że z powodu użycia dwukropka poszczególne grupy lokantów rozdzielone są za pomocą średnika.

Przykład:

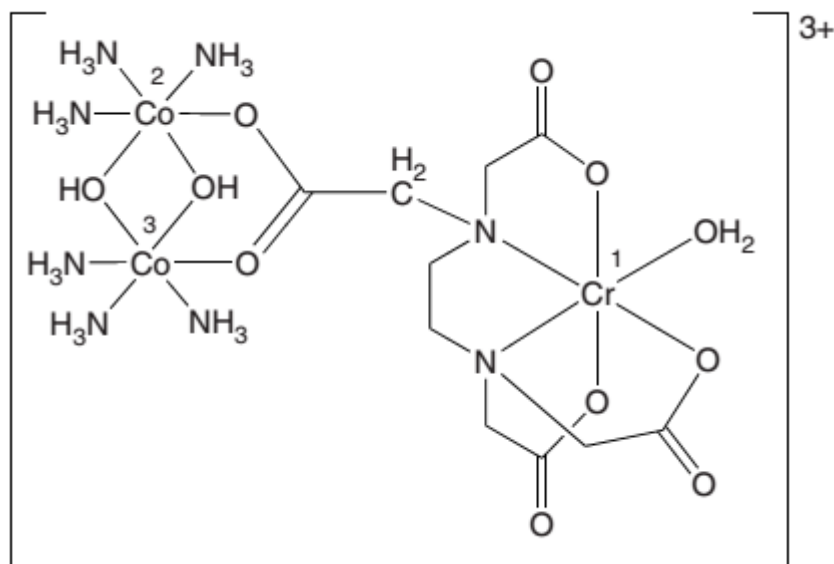


dodekaamina-1 $\kappa^4$ N,2 $\kappa^4$ N,3 $\kappa^4$ N-heksa- $\mu$ -hydroksido-1:4 $\kappa$ O;2:4 $\kappa^4$ O;3:4 $\kappa^4$ O-tetrakobalt(6+)

Lokanty atomów centralnych podane w powyższym przykładzie zostały utworzone stosując reguły omówione w Podrozdziale IR-9.2.5.5 oraz IR-9.2.5.6. W przedstawionym przypadku kobaltowi jako atomowi centralnego przypisany został lokant 4.

Przykład:

5.



heksaamina-2 $\kappa^3N$ ,3 $\kappa^3N$ -akwa-1 $\kappa O$ -{ $\mu_3$ -(etano-1,2-diyłodinitrylo-1 $\kappa N,N'$ )-tetraoctano-1 $\kappa^3O^1,O^2,O^3$ :2 $\kappa O^4$ :3 $\kappa O^{4'}$ }-di- $\mu$ -hydroksido-2:3 $\kappa^4O$ -chromdikobalt(3+)

W powyższej nazwie, oczywista numeracja koordynujących atomów tlenu (1,1',2,2',3,3',4,4') grup karboksylanowych została założona bezpośrednio.

### IR-9.2.5.3 Wiązania metal – metal

Wiązanie metal – metal lub, bardziej ogólnie, wiązanie między atomami centralnymi w jednostce koordynacyjnej, może zostać wyszczególnione w nazwie poprzez umieszczenie zapisanych kursywą symboli odpowiednich atomów centralnych oddzielonych pauzą oraz umieszczonych w nawiasie. Powstały człon zapisuje się po nazwach atomów centralnych oraz przed ładunkiem jonu. Symbole atomów centralnych podaje się w takim samym porządku w jakim ich nazwy występują w nazwie związku koordynacyjnego (według kolejności podanej w Tabeli VI, jeżeli poruszając się zgodnie z kierunek zaznaczonym strzałką dany atom występuje jako ostatni, w nazwie występuje jako pierwszy). Liczbę wiązań zaznacza się za pomocą cyfr arabskich umieszczanych przed pierwszym symbolem atomu od którego oddziela się ja za pomocą spacji. Ze względu na cel nomenklatury, nie wyszczególnia się różnic między porządkiem wiązań. Jeżeli w strukturze związku obecny jest więcej niż jeden atom centralny danego pierwiastka i istnieje potrzebna jednoznaczności wskazania, który z nich tworzy wiązanie (ponieważ dane atomy nie są ekwiwalentnie symetryczne), lokant atomu centralnego (Podrozdział IR 9.2.5.6) może zostać umieszczony w postaci indeksu górnego zaraz po symbolu tego pierwiastka, tak jak zilustrowano to w Przykładzie 4.

Przykłady:

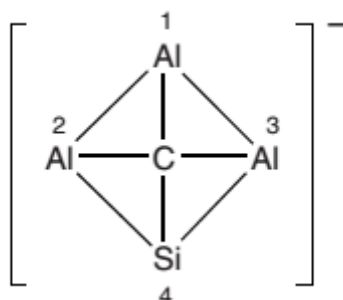


1.  
 $[\text{Cl}_4\text{ReReCl}_4]^{2-}$  (nad ReRe odpowiednio 1 i 2).  
 oktachlorido- $1\kappa^4\text{Cl}, 2\kappa^4\text{Cl}$ -direnian(*Re—Re*)(2-)

2.  
 $[(\text{OC})_5\text{ReCo}(\text{CO})_4]$  (nad ReCo odpowiednio 1 i 2).  
 nonakarbonylo- $1\kappa^5\text{C}, 2\kappa^4\text{C}$ -renkobalt(*Re—Co*)

3.  
 $\text{Cs}_3[\text{Re}_3\text{Cl}_{12}]$   
 dodekachlorido-*triangulo*-trirenian(3 *Re—Re*)(3-)

4.



$\mu_4$ -karbido-kwadro-(triglinkrzem)an( $\text{Al}^1\text{—Al}^2$ ) ( $\text{Al}^1\text{—Al}^3$ )( $\text{Al}^2\text{—Si}$ )( $\text{Al}^3\text{—Si}$ )(1-)

(Przykłady 3 oraz 4 zawierają przedrostki strukturalne *triangulo* oraz *kwadro* które wprowadzone są w Rozdziale IR-9.2.5.7) Należy zwrócić uwagę, że nazwa podana w Przykładzie 3 nie podaje informacji na temat tego, które ligandy w postaci jonów chlorkowych tworzą wiązania z którymi atomami centralnymi.

#### IR-9.2.5.4 Symetryczne dwurdzeniowe jednostki koordynacyjne

W wypadku symetrycznych dwurdzeniowych jednostek koordynacyjnych, nazwy mogą być zostać uproszczone poprzez zastosowanie przedrostków zwielokrotniających.

Przykłady:

1.  $[\text{Re}_2\text{Br}_8]^{2-}$   
 bis(tetrabromidorenian)(*Re—Re*)(2-)

2.  $[\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}]$   
 bis(pentakarbonylomangan)(*Mn—Mn*)

3.  $[\{\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\}_2(\mu\text{-OH})]^{5+}$   
 $\mu$ -hydroksido-bis(pentaaminachrom)(5+)

4.  $[\{\text{PtCl}(\text{PPh}_3)\}_2(\mu\text{-Cl})_2]$   
 di- $\mu$ -chlorido-bis[chlorido(trifenylfosfina)platyna]

5.  $[\{\text{Fe}(\text{NO})_2\}_2(\mu\text{-PPh}_2)_2]$

bis( $\mu$ -difenylfosfido)bis(dinitrozylżelazo)

6.  $[\{\text{Cu}(\text{py})\}_2(\mu\text{-O}_2\text{CMe})_4]$   
tetrakis-( $\mu$ -octano- $\kappa\text{O}:\kappa\text{O}'$ )bis(pirydyna)miedź(II)]

W niektórych przypadkach przedrostki zwielokrotniające mogą być również używane w celu uproszczenia nazw jednostek koordynacyjnych niesymetrycznych (Przykład 5 w Podrozdziale IR-9.2.5.5).

### IR-9.2.5.5 Niesymetryczne dwurdzeniowe jednostki koordynacyjne

Nazwy niesymetrycznych dwurdzeniowych jednostek koordynacyjnych otrzymuje się poprzez zastosowanie ogólnych reguł przedstawionych w Podrozdziałach IR-9.2.5.1 – IR.9.2.5.3.

Przykłady:

1.  $[\text{ClHgIr}(\text{CO})\text{Cl}_2(\text{PPh}_3)_2]$   
karbonylo-1 $\kappa\text{C}$ -trichlorido-1 $\kappa^2\text{Cl}$ ,2 $\kappa\text{Cl}$ -bis(trifenylfosfina-1 $\kappa\text{P}$ )irydręć(*Ir—Hg*)

W powyższym przykładzie, według kolejności zaznaczonej strzałką (Tabela VI), atom irydu występuje jako ostatni (wcześniej obecny jest atom rtęci). Z tego powodu iryd w nazwie powyższego związku podany jest jako pierwszy (przed rtęcią) i otrzymuje lokant 1.

Jedynym pozostającym problemem jest sposób numeracji atomów w przypadkach, w których dwa takie same atomy centralne posiadają różne otoczenie koordynacyjne. W takiej sytuacji, jeżeli jest to możliwe, atom centralny o wyższej liczbie koordynacyjnej otrzymuje niższy lokant. Jeżeli oba atomy posiadają taką samą liczbę koordynacyjną, atom centralny związany z większą liczbą ligandów lub większą liczbą koordynujących atomów, otrzymuje w nazwie niższy lokant. Z tego powodu, w Przykładzie 2, atom chromu związany z pięcioma z dziewięciu obecnych ligandów w postaci cząsteczek amoniaku otrzymuje lokant 1.

Przykłady:

2.  $[(\text{H}_3\text{N})_5\text{Cr}^1(\mu\text{-OH})\text{Cr}^2(\text{NH}_2\text{Me})(\text{NH}_3)_4]^{5+}$   
nonaamina-1 $\kappa_5\text{N}$ ,2 $\kappa_4\text{N}$ - $\mu$ -hydroksido-(metanoamina-2 $\kappa\text{N}$ )dichrom(5+)

3.  $[(\text{H}_3\text{N})_3\text{Co}^1(\mu\text{-NO}_2)(\mu\text{-OH})_2\text{Co}^2(\text{NH}_3)_2(\text{py})]^{3+}$   
pentaamina-1 $\kappa^3\text{N}$ ,2 $\kappa^2\text{N}$ -di- $\mu$ -hydroksido- $\mu$ -azotano(III)-1 $\kappa\text{N}$ :2 $\kappa\text{O}$ -(pirydyna-2 $\kappa\text{N}$ )dikobalt(3+)

4.  $[(\text{bpy})(\text{H}_2\text{O}_2)\text{Cu}^1(\mu\text{-OH})^2\text{Cu}^2(\text{bpy})(\text{SO}_4)_2]$   
akwa-1 $\kappa\text{O}$ -(2,2'-bipirydyna-1 $\kappa^2\text{N}$ , $\text{N}'$ )(2,2'-bipirydyna-2 $\kappa^2\text{N}$ , $\text{N}'$ )-di- $\mu$ -hydroksido-(siarczano-2 $\kappa\text{O}$ )dimiedź(II)

W niektórych przypadkach nie jest konieczne jednoznaczne ponumerowanie dwóch różnie skoordynowanych atomów centralnych aby otrzymać nazwę związku, tak jak zilustrowano to w Przykładzie 5. W celu uproszczenia nazwy, należy zwrócić uwagę na możliwość użycia przedrostków zwielokrotniających, jak zostało to również przedstawione w Podrozdziale IR-9.2.5.4 dla przypadków związków o strukturach w pełni symetrycznych.

### IR-9.2.5.6 Struktury trójrdzeniowe i większe

Metody przedstawione w poprzednich Podrozdziałach dotyczące nazywania ligandów oraz oznaczania w odpowiedni sposób koordynujących atomów są metodami mającymi ogólne zastosowanie i można je stosować niezależnie od liczby atomów centralnych w jednostce koordynacyjnej. Często jednak w wielu przypadkach, w celu otrzymania odpowiedniej addytywnej nazwy danej jednostki koordynacyjnej, konieczne jest numerowanie atomów centralnych. Numeracja taka jest częścią procesu nazewnictwa, który w ogólnym przypadku, wraz ze wzrostem liczby obecnych atomów centralnych staje się coraz bardziej złożony. Niniejszy Podrozdział przedstawia ogólne reguły pozwalające przypisać lokanty atomom centralnym.

W przypadku jednostki koordynacyjnej, w której znajdują się dwa atomy centralne i które nie są atomami tego samego pierwiastka, lokanty atomów centralnych ustala się w oparciu o ich kolejność przy użyciu Tabeli VI. Pierwszy z atomów centralnych, którego symbol pojawia się poruszając się zgodnie z kierunkiem zaznaczonym strzałką, otrzymuje najwyższy lokant. Symbol atomu centralnego, który zostaje w ten osiągnięty jako ostatni, otrzymuje lokant 1. Metodę tę można również zastosować do układów w których obecne atomy centralne są tego samego rodzaju. Wówczas jednak dane atomy centralne muszą być ekwiwalentnie symetryczne. W szczególnych więc przypadkach, atomom centralnym w ogóle nie potrzeba przypisywać lokantów. Warunkiem jest występowanie w danym układzie symetrii czyniącej dane atomy centralne ekwiwalentnie symetrycznymi.

Przykłady:

1.  $[\text{Be}_4(\mu\text{-O})(\mu\text{-O}_2\text{CMe})_6]$   
heksakis( $\mu$ -octano- $\kappa\text{O}:\kappa\text{O}'$ )- $\mu_4$ -oksidotetraedro-tetraberyl

2.  $[\text{Os}_3(\text{CO})_{12}]$   
dodekakarboxylo-1 $\kappa^4\text{C}$ ,2 $\kappa^4\text{C}$ ,3 $\kappa^4\text{C}$ -triangulo-triosm(3 Os—Os)

(Deskryptory tetraedro oraz triangulo wprowadzone są w Podrozdziale IR-9.2.5.7.)

Przykład takiego układu przedstawiony został w Przykładzie 5 w Podrozdziale IR-9.2.5.2. W przypadku tego układu nieistotne jest, który z dwóch atomów kobaltu otrzyma lokant 2 a który 3. Uzyskane systematyczne nazwy w obu przypadkach będą takie same.

Proponowany ogólny proces pozwalający otrzymać koordynacyjną addytywną nazwę układu wielojądrowego przedstawiono poniżej:

- (i) Wyznaczyć atomy centralne oraz ligandy.
- (ii) Nazwać ligandy stosując wyznaczniki  $\kappa$ ,  $\eta$  oraz  $\mu$  (za wyjątkiem lokantów atomów centralnych). Należy zwrócić uwagę na potrzebę zmiany nazwy liganda jeżeli symbole  $\kappa$ ,  $\eta$  oraz  $\mu$  mają zastosowanie jedynie do niektórych części struktury liganda, które w innym przypadku byłyby ekwiwalentne i opisane przy użyciu przedrostków zwielokrotniających takich jak „tri” lub „tris”).
- (iii) Umieścić ligandy w porządku alfabetycznym.
- (iv) Przypisać lokanty atomom centralnym stosując poniższe reguły:
  - (a) Zastosować kolejność symboli atomów poszczególnych pierwiastków podaną w Tabeli VI. Im później dany symbol pojawia się poruszając się zgodnie z kierunkiem zaznaczonym strzałką tym niż otrzymuje lokant. Tę regułę numerowania można stosować jeżeli wszystkie atomy centralne są atomami różnych pierwiastków. Atomom tego samego pierwiastka przypisuje się lokanty stosując kolejne reguły.

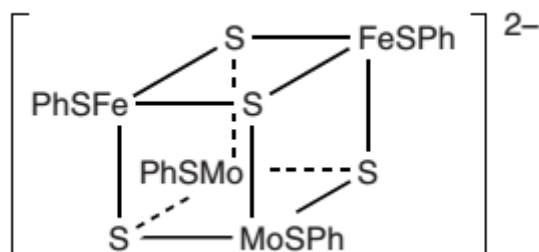
(b) W grupie atomów centralnych tego samego pierwiastka niższy lokant otrzymuje atom centralny o większej liczbie koordynacyjnej.

(c) Należy kontynuować wg alfabetycznego porządku nazw ligandów, analizując nazwy lub nazwę danej części określającej bezpośrednio koordynujące atomy (tak jak wyznaczniki  $\kappa$ ,  $\eta$  oraz  $\mu$ ) lub pośrednio (tak jak nazwa liganda „karbonylo”). Jak tylko wyznaczona zostaje grupa koordynujących atomów, która nie jest równomiernie rozmieszczona wokół atomów centralnych wymagających przypisania różnych lokantów, atom centralny do którego koordynuje większa liczba tych atomów otrzymuje niższy lokant. Proces ten kontynuowany jest tak długo, aż wszystkim atomom centralnym zostają przypisane lokanty lub kiedy zanalizowane zostały wszystkie ligandy.

(d) Jakikolwiek atomy centralne, które nie są ekwiwalentne i którym nie przypisano jeszcze wyróżniających je lokantów, będą wykazywały wyłącznie różnice pod względem bezpośrednio związanych z nimi innych atomów centralnych. Lokanty tych bezpośrednio związanych sąsiednich atomów centralnych są ze sobą porównywane. Atom centralny związany bezpośrednio z innym atomem centralnym posiadającym najniższy lokant otrzymuje najniższy kolejny możliwy lokant (Przykład 9 – poniżej).

Należy zwrócić uwagę aby przypisane atomom centralnym za pomocą powyższych reguł lokanty nie zbiegały się z tymi przypisanymi stosując inne rodzaje nomenklatury takie jak nomenklatura podstawnikowa (Rozdział IR-6), jeżeli ten rodzaj nomenklatury można zastosować, lub rodzaj nomenklatury przedstawiony w Rozdziałach II-1 oraz II-5 pozycji podanej w odnośniku 7.

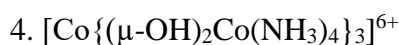
Przykład:

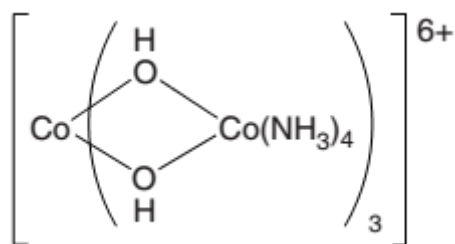


tetrakis(benzenotiolano)-1 $\kappa$ S,2 $\kappa$ S,3 $\kappa$ S,4 $\kappa$ S-tetra- $\mu_3$ -sulfido-  
1:2:3 $\kappa^3$ S;1:2:4 $\kappa^3$ S;1:3:4 $\kappa^3$ S;2:3:4 $\kappa^3$ S-(dimolibdendżelazo)an(2-)

Stosując powyższe reguły, nie otrzymuje się rozróżnienia pomiędzy dwoma atomami molibdenu lub między dwoma atomami żelaza. Jednakże, żadne rozróżnienie pomiędzy wymienionymi atomami nie jest w tym przypadku wymagane.

Przykład:



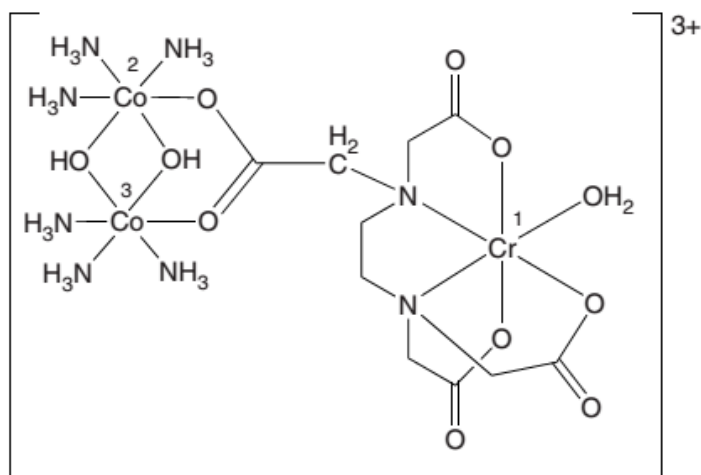


dodekaamina-1 $\kappa^4N$ ,2 $\kappa^4N$ ,3 $\kappa^4N$ -heksa- $\mu$ -hydroksido-1:4 $\kappa O$ ;2:4 $\kappa^4O$ ;3:4 $\kappa^4O$ -tetrakobalt(6+)

Zastosowanie reguł (a) oraz (b) nie pozwala rozróżnić między sobą obecnych czterech atomów kobaltu. Jednak użycie reguły (c) pozwala przypisać trzem zewnętrznym atomom kobaltu lokanty 1, 2 oraz 3. Do atomów tych koordynują ligandy w postaci cząsteczek amoniaku, których obecność w nazwie jednostki koordynacyjnej zaznaczona jest jako pierwsza. Z tego powodu, centralny atom kobaltu otrzymuje lokant 4. Zastosowanie tych reguł pozwala otrzymać nazwę jednostki koordynacyjnej ze względu na występującą w jej przypadku symetrię.

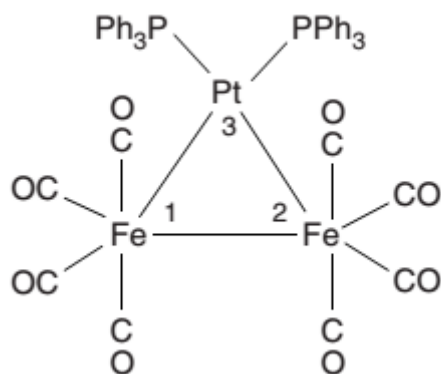
Przykłady:

5.



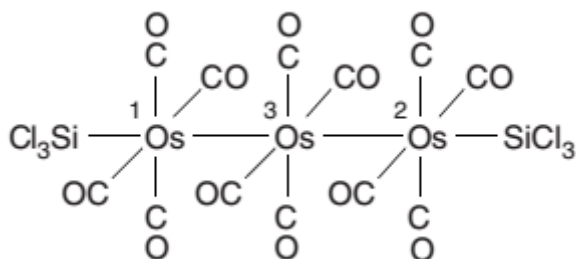
heksaamina-2 $\kappa^3N$ ,3 $\kappa^3N$ -akwa-1 $\kappa O$ -{ $\mu_3$ -(etano-1,2-diyłodinitrylo-1 $\kappa N,N'$ )-tetraoctano-1 $\kappa^3O^1,O^2,O^3$ :2 $\kappa O^4$ :3 $\kappa O^{4'}$ }-di- $\mu$ -hydroksido-2:3 $\kappa^4O$ -chromdikobalt(3+)

6.



oktakarbonylo-1 $\kappa^4$ C,2 $\kappa^4$ C-bis(trifenylfosfina-3 $\kappa$ P)-triangulo-dizelazoplatyna(*Fe—Fe*)(2  
*Fe—Pt*)

7. [Os<sub>3</sub>(CO)<sub>12</sub>(SiCl<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]

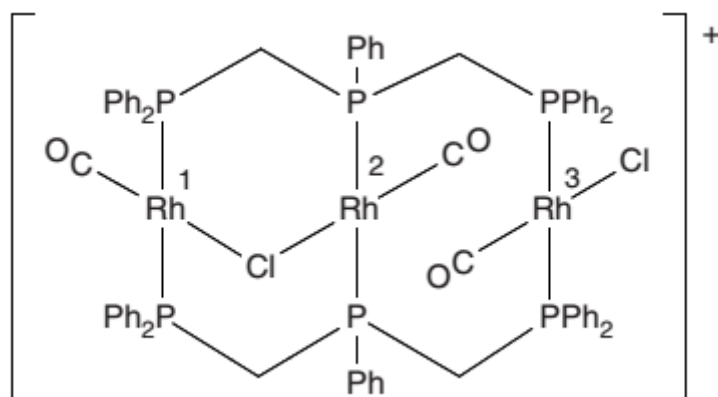


dodekakarbonylo-1 $\kappa^4$ C,2 $\kappa^4$ C,3 $\kappa^4$ C-bis(trichlorosililo)-1 $\kappa$ Si,2 $\kappa$ Si-triosm(*Os*<sup>1</sup>—*Os*<sup>3</sup>)(*Os*<sup>2</sup>—*Os*<sup>3</sup>)

Wszystkie trzy atomy osmu posiadają cztery ligandy w postaci cząsteczek tlenku węgla. Dwa atomy osmu, które skoordynowane przez grupy trichlorosililowe, posiadają lokanty 1 oraz 2. Ligandy te, jako niebędące równomiernie rozmieszczone, występują w nazwie jako pierwsze. Symetria jednostki koordynacyjnej przyczynia się do dowolności w przypisaniu lokantów 1 oraz 2.

Przykład:

8.



trikarbonylo-1 $\kappa$ C,2 $\kappa$ C,3 $\kappa$ C- $\mu$ -chlorido-1:2 $\kappa^2$ Cl-chlorido-3 $\kappa$ Cl-bis{ $\mu_3$ -bis[(difenylfosfino)metylo]-1 $\kappa$ P:3 $\kappa$ P'-fenylofosfina-2 $\kappa$ P}-trirod(1+)

lub, używając zalecanej przez IUPAC nazwy<sup>1</sup> dla ligandu fosfanowego\*:

trikarbonylo-1 $\kappa$ C,2 $\kappa$ C,3 $\kappa$ C- $\mu$ -chlorido-1:2 $\kappa^2$ Cl-chlorido-3 $\kappa$ Cl-bis{ $\mu_3$ -fenylofosfanodiylo-1 $\kappa$ O-bis(metyleno)]bis(difenylofosfan)-2 $\kappa$ P':3 $\kappa$ P''}trirod(1+)

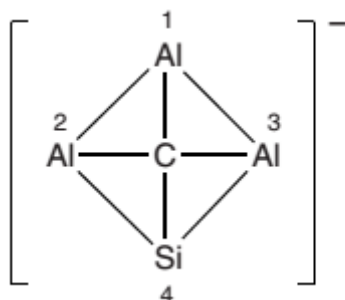
Przykład 8 przedstawia w jaki sposób użycie różnych (pod względem systematycznym równoważnych) nazw dla ligandów może prowadzić do różnych addytywnych nazw i różnych lokantów.

W pierwszej z podanych nazw, miejsce w którym atomy rodu zostają rozróżnione jako nieekwiwalentne występuje dla członu zawierającego symbol kappa powiązany z nazwą liganda podaną jako  $\mu$ -chlorido. Z tego powodu, atomy rodu będące skoordynowane przez mostkowe aniony chlorkowe otrzymują lokanty 1 oraz 2 (na tym jednak etapie nie wiadomo, który z nich otrzymuje dany lokant), a ostatni z atomów rodu otrzymuje lokant 3. Kolejną różnicą w nazwie związku, która odnosi się do atomów centralnych 1 lub 2 jest powiązany z symbolem kappa człon difenylofosfino. Związane z tym członem części liganda skoordynowane są do terminalnych atomów rodu. Jednemu z terminalnych atomów rodu przypisano już lokant 3 więc kolejny z nich otrzymuje lokant 1. Środkowy atom rodu otrzymuje lokant 2.

W przypadku drugiej z podanych nazw, lokant 3 został przypisany w ten sam sposób. Natomiast środkowy atom rodu powinien otrzymać lokant 1 ponieważ odnosząca się do tego atomu nazwa liganda pojawia się w tej nazwie związku wcześniej (w powiązanej z symbolem kappa nazwie fenylofosfanodiylo).

Przykład:

9.



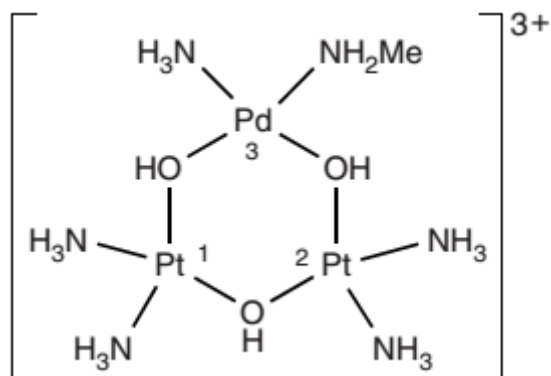
$\mu_4$ -karbido-kwadro-triglinkrzem)an( $Al^1—Al^2$ )( $Al^1—Al^3$ )( $Al^2—Si$ )( $Al^3—Si$ )(1-)

W powyższym przykładzie (Przykład 9) lokanty atomów centralnych przypisano w następujący sposób. Zastosowanie reguły (a), powyżej, skutkuje przypisaniem atomowi krzemu lokantu 4. Liczby koordynacyjne oraz rozmieszczenie ligandów są takie same dla wszystkich trzech atomów glinu, które różnią się tylko pod względem związania z innymi atomami centralnymi. Lokanty dla atomów glinu otrzymuje się poprzez zastosowanie wyżej przedstawionej reguły (d).

Przedrostek „cyklo”, który pisany jest kursywą oraz który wymienia się przed wszystkich ligandami, może być stosowany do związków monocyklicznych.

] \*Fosfan jest nazwą zalecaną dla  $PH_3$ .

10.

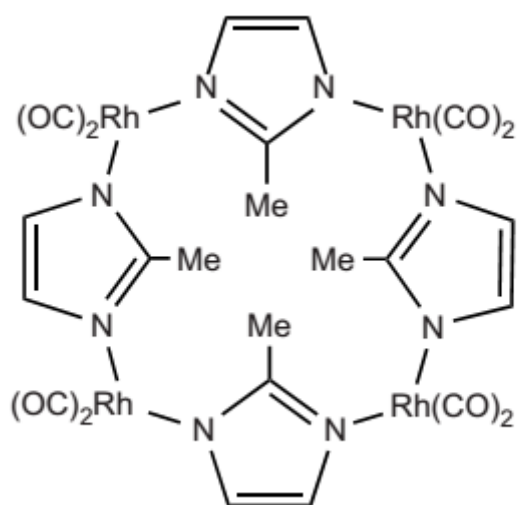


*cyklo-pentaamina-1κ<sup>2</sup>N,2κ<sup>2</sup>N,3κN-tri-μ-hydroksido-1:2κ<sup>2</sup>O;1:3κ<sup>2</sup>O;2:3κ<sup>2</sup>O-(metyloamina-3κN)-diplatynapallad(3+)*

Występujące dwa atomy platyny są ekwiwalentne oraz otrzymują niższe lokanty niż atom palladu – reguła (a).

Przykłady:

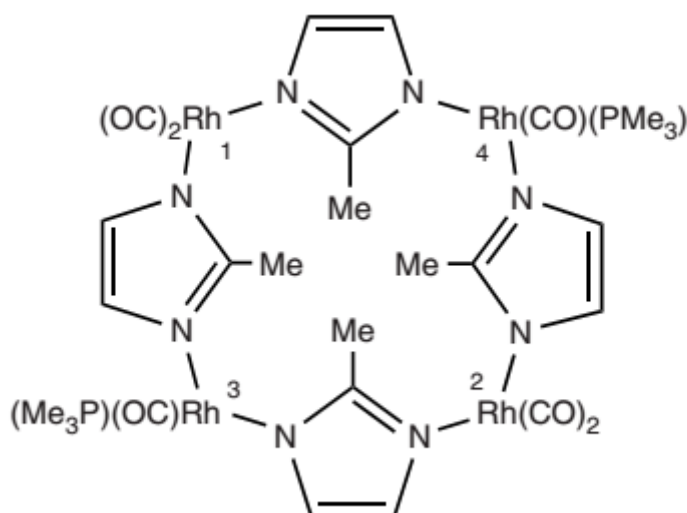
11.



*cyklo-tetrakis(μ-2-metyloimidazolano-κN<sup>1</sup>:κN<sup>3</sup>)tetrakis(dikarbonylrod)*

12.





cyklo-heksakarbonyl-1 $\kappa^2$ C,2 $\kappa^2$ C,3 $\kappa$ C,4 $\kappa$ C-tetrakis( $\mu$ -2-metylo-1*H*-imidazol-1-ido)-1:3 $\kappa^2$ N<sup>1</sup>:N<sup>3</sup>;1:4 $\kappa^2$ N<sup>3</sup>:N<sup>1</sup>;2:3 $\kappa^2$ N<sup>3</sup>:N<sup>1</sup>;2:4 $\kappa^2$ N<sup>1</sup>:N<sup>3</sup>-bis(trimetylofosfan)-3 $\kappa$ P,4 $\kappa$ P-tettrarod

### IR-9.2.5.7 Klasterstwo wielojądrowe: symetryczne centralne jednostki strukturalne

Struktury złożonych jednostek koordynacyjnych mogą być opisane przy użyciu systemu *centralnej jednostki strukturalnej* (CSU) (ang. *central structural unit*). W systemie tym pod uwagę brane są tylko atomy centralne. W wypadku klasterów nieliniowych, do opisu centralnych jednostek strukturalnych używa się deskryptorów takich jak *triangulo*, *tetraedro* i *dodekaedro*, w sposób w jaki zostało to przedstawione w powyższych przykładach. Jednakże, w związku z rozwojem syntezy chemicznej użycie powyższego systemu ma zastosowanie jedynie do prostych przypadków. Bardziej obszerny system deskryptorów CSU oraz system numerowania CEP (Casey, Evans, Powell) opracowany został dla związków boru posiadających poliborowe wielościany o trójkątnych ścianach. Deskryptory CEP są systematycznymi alternatywami deskryptorów tradycyjnych dla wielościanów o wszystkich ścianach trójkątnych (deltaedrycznych). Przykłady podano w Tabeli IR-9.1.

Tabela IR-9.1 Deskryptory strukturalne

Liczba atomów w CSU	Deskryptor	Grupa punktowa	Deskryptor CEP
3	triangulo	$D_{3h}$	
4	kwadro	$D_{4h}$	
4	tetraedro	$T_d$	$[T_d-(13)-\Delta^4\text{-klos}]$
5		$D_{3h}$	$[D_{3h}-(131)-\Delta^6\text{-klos}]$
6	oktaedro	$O_h$	$[O_h-(141)-\Delta^8\text{-klos}]$
6	tripryzmo	$D_{3h}$	
8	antypryzmo	$S_6$	
8	dodekaedro	$D_{2d}$	$[D_{2d}-(2222)-\Delta^8\text{-klos}]$
8	heksaedro (sześcián)	$O_h$	
12	ikozaedro	$I_h$	$[I_h-(1551)-\Delta^{20}\text{-klos}]$

W skrócie, numerowanie CSU opera się na określeniu osi odniesienia i prostopadłych do tej osi płaszczyzn atomów. Osią odniesienia jest oś obrotu o najwyższej symetrii. Jako pierwszą numeruje się płaszczyznę prostopadłą do osi z pojedynczym atomem (lub najmniejszą liczbą atomów). Orientuje się CSU tak, aby pierwszy lokant, na płaszczyźnie zawierającej więcej niż jeden lokant, był ustawiony w położeniu godziny 12. Następnie przypisuje się lokanty liczbowe pozycji osiowej lub każdej pozycji na pierwszej płaszczyźnie, poczynając od położenia na godzinie 12 i poruszając się zgodnie lub przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Z pierwszej płaszczyzny przesuwa się do następnej i kontynuuje numerowanie w tym samym kierunku (zgodnie lub przeciwnie do ruchu wskazówek zegara), powracając zawsze do pozycji godziny dwunastej lub pozycji najbliższej do niej. Numerowanie kontynuuje się w ten sposób tak długo, aż wszystkie pozycje zostaną ponumerowane.

Pełna dyskusja numerowania deltaedrów znajduje się w cytowanej literaturze.<sup>8</sup> Kompletny deskryptor CSU powinien być umieszczony tuż przed listą atomów centralnych. Tam, gdzie jest to ważne ze względów strukturalnych, należy wskazać wiązanie metal – metal (Podrozdział IR-9.2.5.3 oraz poniższe przykłady).

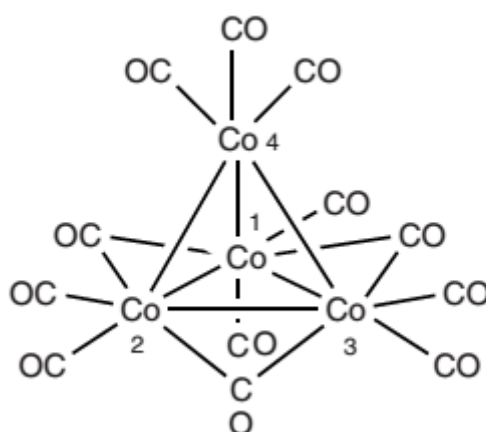
Za pomocą systemu CSU atomy w strukturach łańcuchowych lub pierścieniowych numeruje się kolejno i następnie stosuje się reguły (a) – (d) podane w Podrozdziale IR 9.2.5.6. W poniższym Przykładzie 3, numerowanie za pomocą CSU zbiega się z tym, które uzyskiwane jest poprzez stosowanie wyłącznie podanych wcześniej reguł (a) – (d).

Przykłady:

1.  $[\{\text{Co}(\text{CO})_3\}_3(\mu_3\text{-CBr})]$   
 $(\mu_3\text{-bromometylo-triido})\text{nonakarbonylo-triangulo-trikobalt}(3 \text{ Co—Co}),$   
 $(\mu_3\text{-bromometylo-triido})\text{-triangulo-tris(trikarbonylokobalt)}(3 \text{ Co—Co})$

2.  $[\text{Cu}_4(\mu_3\text{-I})_4(\text{PEt}_3)_4]$   
tetra- $\mu_3$ -jodido-tetrakis(trietylofosfan)-*tetraedro*-tetramiedź, lub  
tetra- $\mu_3$ -jodido-tetrakis(trietylofosfan)- $[T_d(13)\text{-}\Delta^4\text{-kloso}]$ -tetramiedź

3.  $[\text{Co}_4(\text{CO})_{12}]$



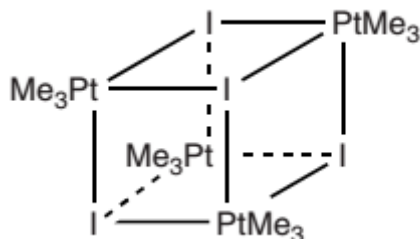
tri- $\mu$ -karbonylo-1:2 $\kappa^2\text{C};1:3\kappa^2\text{C};2:3\kappa^2\text{C}$ -nonakarbonylo-1 $\kappa^2\text{C},2\kappa^2\text{C},3\kappa^2\text{C},4\kappa^3\text{C}$ - $[T_d(13)\text{-}\Delta^4\text{-kloso}]$ -tetrakobalt(6  $\text{Co—Co}$ )

Powyższy związek został także nazwany w Podrozdziale II-5.3.3.3.6 pozycji podanej w odnośniku 7, przy użyciu nomenklatury związków łańcuchowych i pierścieniowych. Nazwa podana tutaj opiera się jednak na zupełnie innym systemie nomenklatury.

Przykłady:

4.  $[\text{Mo}_6\text{S}_8]^{2-}$   
 okta- $\mu_3$ -sulfido-oktaedro-heksamolibdenian(2-), lub  
 okta- $\mu_3$ -sulfido- $[\text{O}_h$ -(141)- $\Delta^8$ -kloso]-heksamolibednian(2-)

5.



tetra- $\mu_3$ -jodido-1:2:3 $\kappa^3$ I;1:2:4 $\kappa^3$ I;1:3:4 $\kappa^3$ I;2:3:4 $\kappa^3$ I-dodekametylo-1 $\kappa^3$ C,2 $\kappa^3$ C,3 $\kappa^3$ C,4 $\kappa^3$ C-tetraedro-tetraplatyna(IV), lub  
 tetra- $\mu_3$ -jodido-1:2:3 $\kappa^3$ I;1:2:4 $\kappa^3$ I;1:3:4 $\kappa^3$ I;2:3:4 $\kappa^3$ I-dodekametylo-1 $\kappa^3$ C,2 $\kappa^3$ C,3 $\kappa^3$ C,4 $\kappa^3$ C- $[\text{T}_d$ -(13)- $\Delta^4$ -kloso]-tetraplatyna(IV)

6.  $[(\text{HgMe})_4(\mu_4\text{-S})]^{2+}$   
 $\mu_4$ -sulfido-tetrakis-(metylortec)(2+). lub  
 tetrametylo-1 $\kappa$ C,2 $\kappa$ C,3 $\kappa$ C,4 $\kappa$ C- $\mu_4$ -sulfido-tetraedro-tetrartec(2+), lub  
 tetrametylo-1 $\kappa$ C,2 $\kappa$ C,3 $\kappa$ C,4 $\kappa$ C- $\mu_4$ -sulfido- $[\text{T}_d$ -(13)- $\Delta^4$ -kloso]-tetrartec(2+)

## IR-9.3 Opis konfiguracji jednostek koordynacyjnych

### IR-9.3.1 Wprowadzenie

Jeżeli konstytucja jednostki koordynacyjnej została określona, pozostaje wyznaczyć przestrzenne zależności pomiędzy strukturalnymi składnikami cząsteczki lub jonu. Cząsteczki, które różnią się tylko przestrzennym rozmieszczeniem ich składników nazywane są stereoizomerami. Stereoizomery, które są swoimi odbiciami lustrzanymi nazywane są enancjomerami (lub czasami izomerami optycznymi), jeżeli warunek ten nie jest spełniony układy takie nazywa się diastereoizomerami (lub izomerami geometrycznymi). Jest to bardzo ważna różnica między tymi dwoma rodzajami układów. Diastereoizomery wykazują między sobą różnice we właściwościach fizycznych, chemicznych oraz spektroskopowych, podczas gdy układy będące dla siebie enancjomerami nie wykazujących różnic we właściwościach fizycznych i spektroskopowych. Właściwości chemiczne dwóch enancjomerów są również w większości takie same (wyjątek stanowią oddziaływania z innymi chiralnymi układami). W celu ustalenia sposobu opisanie konfiguracji cząsteczki (oraz powiązanych przestrzennych zależności) użytecznym jest znalezienie analogii mającej swoje odzwierciedlenie w codzienności.

Używając terminologii wprowadzonej wyżej, prawa oraz lewa ręka mogą być uważane jako wzajemne enancjomery. Prawa oraz lewa ręka różnią się między sobą (nie mogą zostać na siebie nałożone), są natomiast wzajemnymi odbiciami lustrzanymi. Zarówno w przypadku

prawej jak i lewej ręki, kciuk znajduje się obok palca wskazującego. Pozostałe części obu rąk również są względem siebie rozmieszczone w taki sam sposób. Jeżeli w jednej ręce kciuk oraz palec wskazujący zostałyby zamienione miejscami, taka zmodyfikowana ręka byłaby względem niezmiennionej ręki jej diastereoizomerem (jeżeli niezmienniona ręka została zmieniona w analogiczny sposób, obie ręce pozostałyby dalej enancjomerami). Istotną kwestią w przypadku diastereoizomerów jest inne wzajemne rozmieszczenie budujących je składników (zmieniona oraz niezmienniona ręka).

W celu pełnego opisanie ręki, jej składniki (cztery palce, jeden kciuk oraz jej centralna część) muszą zostać określone. Wyznaczyć również należy odpowiednie punkty połączeń składników w ręce, ich pozycje względem siebie oraz podać czy ręka jest prawa czy lewa. Trzy ostatnie etapy umożliwiają podanie konfiguracji ręki.

W przypadku związków koordynacyjnych, nazwa oraz wzór związku opisują ligandy oraz atomy centralne. Opisując konfiguracje takiego związku koordynacyjnego wymagane jest rozpatrzenie trzech czynników:

- (i) geometria koordynacyjna – określenie kształtu cząsteczki jako całości;
- (ii) konfiguracja względna – opis względnych położenia składników cząsteczki, tj. określenie rozmieszczenia ligandów wokół atomu centralnego (lub atomów centralnych) w wyznaczonej geometrii;
- (iii) konfiguracja absolutna – określenie rodzaju enancjomeru (jeżeli odbicia lustrzane cząsteczek nie nakładają się).

W kolejnych trzech podrozdziałach, przedstawione wyżej etapy są kolejno opisane. Bardziej szczegółowa dyskusja konfiguracji związków koordynacyjnych znajduje się w innych źródłach.<sup>9</sup>

## **IR-9.3.2 Opis geometrii koordynacyjnej**

### **IR-9.3.2.1 Symbol wielościanu koordynacyjnego**

Dla liczb koordynacyjnych większych niż jeden możliwe jest różne geometryczne rozmieszczenia atomów związanych z atomem centralnym. Z tego powodu, w przypadku jednostki koordynacyjnej w której atom centralny przyjmuje liczbę koordynacyjną 2, możliwe do zaobserwowania jest liniowe bądź zgięte (kątowe?) rozmieszczenie ligandów oraz atomu centralnego. Podobnie, w przypadku jednostki w której atom centralny przyjmuje liczbę koordynacyjną 3, układ może przyjmować geometrię płaskiego trójkąta lub piramidy trygonalnej, natomiast układ z atomem centralnym o liczbie koordynacji 4 może posiadać geometrię płaską kwadratową, tetraedru lub piramidy o podstawie kwadratu. Wielościan koordynacyjny (lub wielokąt w przypadku układu o płaskiej geometrii) może zostać uwzględniony w nazwie związku poprzez dodanie odpowiedniego zrostka nazywanego symbolem wielościanu. Deskryptor ten pozwala rozróżnić między sobą izomery różniące się geometrią wielościanu koordynacyjnego.

Symbol wielościanu koordynacyjnego należy przypisać przed rozważaniem wszystkich innych cech stereochemicznych. Symbol ten składa się z jednej lub kilku dużych liter pisanych kursywą, które wywodzą się od powszechnie stosowanych angielskich nazw określających wyidealizowaną geometrię ligandów wokół centrum koordynacyjnego, oraz liczebnika liczbowego pisanego w postaci liczby arabskiej wskazującego liczbę koordynacyjną atomu centralnego.

Zazwyczaj występują odkształcenia od wyidealizowanej geometrii, jednak w praktyce struktury cząsteczkowe odnosi się do wyidealizowanych modeli. Symbol wielościanu koordynacyjnego używany jest jako przedrostek, zawarty w nawiasach i oddzielony od nazwy łącznikiem. Symbole wielościanów koordynacyjnych dla najczęściej spotykanych geometrii

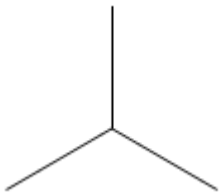


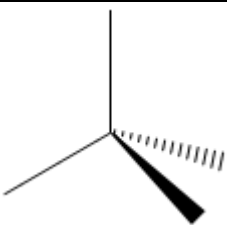
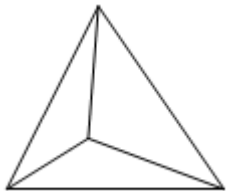





koordynacyjnych o liczbach koordynacyjnych od 2 do 9 podano w Tabeli IR-9.2, a odpowiadające im struktury i/lub wielościany, podano w Tabeli IR-9.3.


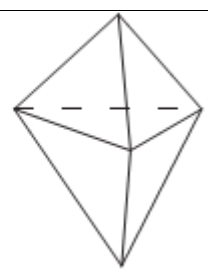

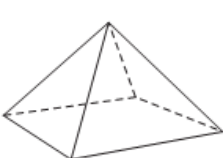
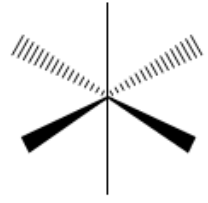
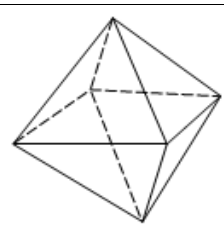
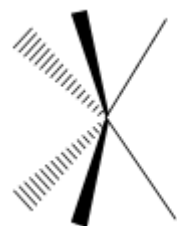
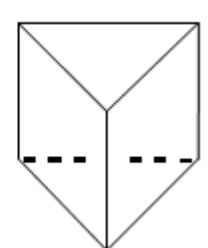
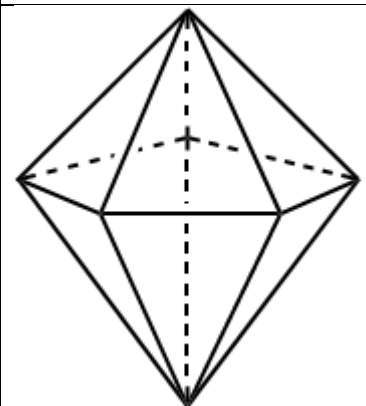
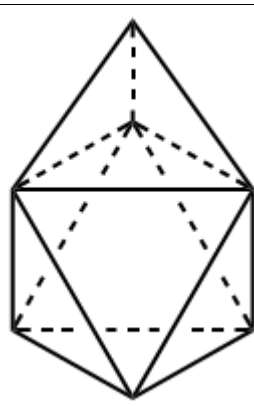
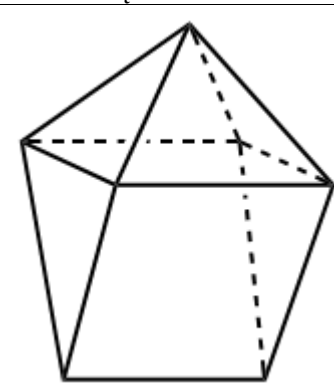
**Tabela IR-9.2** Symbole wielościanów koordynacyjnych<sup>a</sup>

<i>Wielościan koordynacyjny</i>	<i>Liczba koordynacyjna</i>	<i>Symbol wielościanu</i>
liniowy	2	<i>L-2</i>
kątowy	2	<i>A-2</i>
trójkąt	3	<i>TP-3</i>
piramida trygonalna	3	<i>TPY-3</i>
T-kształtny	3	<i>TS-3</i>
tetraedr	4	<i>T-4</i>
kwadrat	4	<i>SP-4</i>
piramida o podstawie kwadratu	4	<i>SPY-4</i>
podparta-deska <sup>b</sup>	4	<i>SS-4</i>
bipiramida trygonalna	5	<i>TBPY-5</i>
piramida o podstawie kwadratu	5	<i>SPY-5</i>
oktaedr	6	<i>OC-6</i>
słup trygonalny <sup>c</sup>	6	<i>TPR-6</i>
bipiramida pentagonalna	7	<i>PBPY-7</i>
jednonakryty oktaedr	7	<i>OCF-7</i>
słup trygonalny z jednonakrytą ścianą kwadratową	7	<i>TPRS-7</i>
sześcian	8	<i>CU-8</i>
antysłup o podstawie kwadratu	8	<i>SAPR-8</i>
dodekaedr	8	<i>DD-8</i>
bipiramida heksagonalna	8	<i>HBPY-8</i>
podwójnie nakryty w pozycji <i>trans</i> oktaedr	8	<i>OCT-8</i>
podwójnie nakryty nad ścianami trójkątnymi słup trygonalny	8	<i>TPRT-8</i>
podwójnie nakryty nad ścianami kwadratowymi słup trygonalny	8	<i>TPRS-8</i>
potrójnie nakryty nad ścianami kwadratowymi słup trygonalny	9	<i>TPRS-9</i>
bipiramida heptagonalna	9	<i>HBPY-9</i>

<sup>a</sup> W rzeczywistości nie wszystkie geometrie mogą być reprezentowane przez wielościany. <sup>b</sup> Angielskie określenie tego typu wielościanu to *see-saw* oznaczające zabawkę dla dzieci. Polskie tłumaczenie *podparta-deska* zostało uznane jako najbardziej odpowiednie. <sup>c</sup> Angielskie określenie *prism* w odniesieniu do geometrii oznacza wielościan, który jest graniastoslupem. Użycie określenia *słup* jest jednak bardziej praktyczne.

**Tabela IR-9.3** Symbole wielościanów koordynacyjnych, struktury geometryczne i/lub wielościany

<i>liczba koordynacyjna 3</i>				
	trójkąt	piramida trygonalna	T-kształtny	
				
	<i>TP-3</i>	<i>TPY-3</i>	<i>TS-3</i>	
<i>liczba koordynacyjna 4</i>				
tetraedr			kwadrat	
				
<i>T-4</i>			<i>SP-4</i>	
piramida o podstawie kwadratu			podparta deska	
				
<i>SPY-4</i>			<i>SS-4</i>	
<i>Liczba koordynacyjna 5</i>				
bipiramida trygonalna			piramida o podstawie kwadratu	

 				 	
<i>TBPY-5</i>				<i>SPY-5</i>	
<i>liczba koordynacyjna 6</i>					
oktaedr			słup trygonalny		
 				 	
<i>OC-6</i>				<i>TPR-6</i>	
<i>liczba koordynacyjna 7</i>					
bipiramida pentagonalna		jednonakryty oktaedr		słup trygonalny z jednonakrytą kwadratową ścianą	
					
<i>PBPY-7</i>		<i>OCF-7</i>		<i>TPRS-7</i>	
<i>liczba koordynacyjna 8</i>					
sześcian	antysłup o podstawie kwadratu	dodekaedr	bipiramida heksagonalna		

<i>CU-8</i>	<i>SAPR-8</i>	<i>DD-8</i>	<i>HBPY-8</i>
podwójnie nakryty w pozycji <i>trans</i> oktaedr		podwójnie nakryty nad ścianami trójkątnymi słup trygonalny	podwójnie nakryty nad ścianami kwadratowymi słup trygonalny
<i>OCT-8</i>	<i>TPRT-8</i>	<i>TPRS-8</i>	
	potrójnie nakryty nad ścianami kwadratowymi słup trygonalny	bipiramida heptagonalna	
	<i>TPRS-9</i>	<i>HBPY-9</i>	

### IR-9.3.2.2 - Wybór między blisko związanymi geometriami

Dla rzeczywistych cząsteczek lub jonów, deskryptor stereochemiczny powinien być oparty na najbliższej wyidealizowanej geometrii. Jednakże, wiele wyidealizowanych geometrii jest ze sobą blisko związana [np. kwadrat (*SP-4*), piramida o podstawie kwadratu (*SPY-4*), podparta



deska (*SS-4*), oraz tetraedr (*T-4*); T-kształtny (*TS-3*), trójkąt (*TP-3*) oraz piramida trygonalna (*TPY-3*)] co wymaga ostrożności w dokonywaniu właściwego wyboru.

Następujące podejście jest użyteczne w celu wyboru symbolu wielościanu koordynacyjnego w przypadku struktur czterokoordynacyjnych. Kluczem tej metody jest rozważenie wzajemnego położenia atomu centralnego oraz atomów do niego koordynujących. Jeżeli wszystkie pięć atomów znajdują się (lub są bardzo blisko znajdowania się) w tej samej płaszczyźnie, układ taki powinien zostać potraktowany jako kwadrat. Jeżeli cztery koordynujące atomy znajdują się w tej samej płaszczyźnie, ale atom centralny swym położeniem od niej znacząco odbiega, poprawna geometria powinna zostać opisana jako piramida o podstawie kwadratu. Jeżeli natomiast koordynujące atomy nie znajdują się w tej samej płaszczyźnie (oraz nie są blisko znajdowania się w niej), wybór właściwego wielościanu dokonywane jest poprzez połączenie za pomocą linii wszystkich koordynujących atomów. Jeżeli atom centralny znajduje się wewnątrz tak utworzonego wielościanu, układ powinien zostać opisany jako tetraedr, w innym przypadku właściwą geometrią będzie podparta deska.

Układy T-kształtne oraz o geometrii trójkąta posiadają atom centralny leżący w (lub praktycznie leżący w) płaszczyźnie wyznaczonej przez koordynujące atomy. W układzie mogącym zostać opisanym geometrią trójkąta kąty między trzema koordynującymi atomami są w przybliżeniu takie same podczas gdy w układzie T-kształtnym jeden z nich jest wyraźnie większy. W przypadku struktury opisanej za pomocą piramidy trygonalnej atom centralny położenie atomu centralnego odbiega znacząco od płaszczyzny wyznaczonej przez koordynujące atomy.

### **IR-9.3.3 Opisywanie konfiguracji - rozróżnienie pomiędzy diastereoizomerami**

#### **IR-9.3.3.1 Informacje ogólne**

W celu określenia danego diastereoizomeru należy opisać rozmieszczenie ligandów wokół atomu centralnego. Istnieje wiele powszechnie spotykanych terminów (np. *cis*, *trans*, *mer* oraz *fac*), które używane są do opisu względnego położenia ligandów w prostych układach. Mogą jednak być używane tylko wtedy, kiedy układ posiada wyróżnioną geometrię (np. opisaną jako kwadrat bądź oktaedr) oraz kiedy występują tylko dwa rodzaje atomów donorowych (np.  $Ma_2b_2$  w układzie koordynacyjnym opisanym jako kwadrat, gdzie M oznacza atom centralny a „a” oraz „b” są rodzajami atomów donorowych).

W przypadku bardziej złożonych układów, w celu rozróżnienia poszczególnych diastereoizomerów stosuje się kilka metod. Z tego powodu, stereoizomery otrzymane w wyniku koordynowania liniowych czterokleszczowych ligandów często są określane jako *trans*, *cis- $\alpha$*  oraz *cis- $\beta$* ,<sup>10</sup> a te otrzymanego w wyniku koordynowania czterokleszczowych ligandów makrocyclicznych określa się według opracowanego dla nich systemu.<sup>11</sup> Zakres większości tych systemów nomenklatury z reguły jest ograniczony, jednakże system o szerszym zastosowaniu w opisie jednostek koordynacyjnych ligandów wielokleszczowych został już zaproponowany.<sup>12</sup>

Niemniej jednak, potrzebna jest ogólna metoda mająca zastosowanie w odróżnianiu między sobą diastereoizomerów związków w przypadku których możliwe są inne geometrie lub w których obecne są więcej niż dwa rodzaje koordynujących atomów. W tym celu opracowano *wskaźnik konfiguracyjny*. Metoda stosowana w celu przypisania danemu związkowi wskaźnika konfiguracyjnego omówiona została w kolejnym podrozdziale. W dalszych podrozdziałach zawarto szczegóły dotyczące poszczególnych rodzajów geometrii. Dla każdego z omawianych rodzajów geometrii podano powszechnie używane terminy.

#### **IR-9.3.3.2 Wskaźnik konfiguracyjny**

Po określeniu geometrii koordynacyjnej za pomocą odpowiedniego symbolu wielościanu, konieczne jest określenie zajmowanych przez ligandy (lub atomy donorowe) poszczególnych położeń koordynacyjnych. Uzyskiwane jest to przez zastosowanie wskaźnika konfiguracyjnego, który jest ciągiem cyfr określających położenia koordynujących atomów na wierzchołkach wielościanu koordynacyjnego. Wskaźnik konfiguracyjny pozwala rozróżnić diastereoizomery i umieszcza się go w nawiasie, w którym ujęty jest symbol wielościanu (Podrozdział IR-9.3.2.1). Podaje się go za symbolem wielościanu, od którego oddzielony jest łącznikiem.

Każdemu z obecnych atomów donorowych należy przyporządkować liczbę pierwszeństwa. Proces ten opiera się na regułach rozwiniętych przez Cahna, Ingolda i Preloga (reguły CIP).<sup>13</sup> Tak otrzymane liczby pierwszeństwa są następnie wykorzystywane do utworzenia odpowiedniego dla danego związku wskaźnika konfiguracyjnego. Stosowanie reguł CIP dla związków koordynacyjnego szczegółowo omówiono w Podrozdziale IR-9.3.3.5. Uogólniając jednak, atomy donorowe posiadające większe liczby atomowe posiadają wyższe pierwszeństwo w stosunku do atomów o niższych liczbach atomowych.

W odniesieniu do niektórych liczb wskaźnika konfiguracyjnego, obecność ligandów wielokleszczowych może powodować wymóg stosowania znaków prim. Znaków prim używa się w celu zaznaczenia, które z atomów donorowych nie stanowią części tego samego liganda wielokleszczowego (w przeciwieństwie do atomów, których liczby pierwszeństwa nie są związane ze znakami prim) lub w celu zaznaczenia przynależności danych atomów donorowych do innych części liganda wielokleszczowego związanych ze sobą symetrią. Liczby pierwszeństwa oznaczone znakiem prim oznaczają, że odnoszące się do nich atomy donorowe posiadają niższe pierwszeństwo niż atomy donorowe tego samego rodzaju, których liczby pierwszeństwa nie są oznaczone za pomocą znaków prim. Więcej informacji związanych z użyciem znaków prim zawartych zostało w Podrozdziale IR-9.3.5.3.

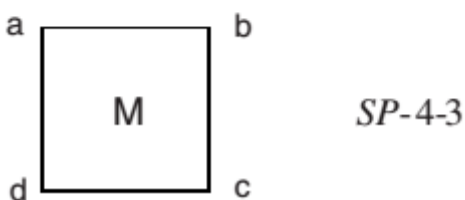
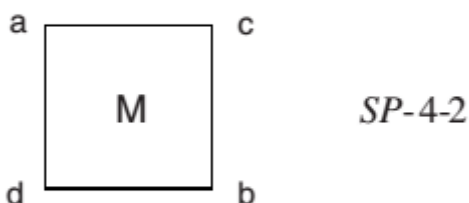
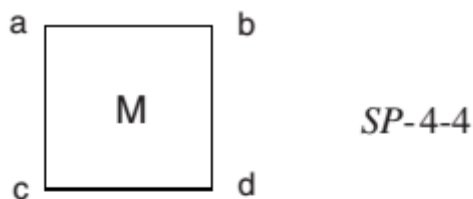
### IR-9.3.3.3 Układy koordynacyjne kwadratowe (SP-4)

W celu rozróżnienia poszczególnych stereoizomerów w układach kwadratowych typu [Ma<sub>2</sub>b<sub>2</sub>] (M oznacza atom centralny, natomiast "a" oraz "b" oznaczają rodzaje koordynujących atomów) powszechne jest stosowanie terminów *cis* oraz *trans*. Jednakowe atomy donorowe w izomerach *cis* zajmują położenia koordynacyjne sąsiadujące ze sobą, w izomerach *trans* natomiast zajmowane położenia są względem siebie przeciwne. Terminologia *cis-trans* nie nadaje się do rozróżnienia poszczególnych izomerów jednostki koordynacyjnej kwadratowej typu [Mabcd], ale może być zasadniczo użyta do układów [Ma<sub>2</sub>bc], dla których terminy *cis* oraz *trans* odnoszą się do względnych położeń podobnych atomów donorowych (użycie tej metody do tego przypadku nie jest jednak zalecane).

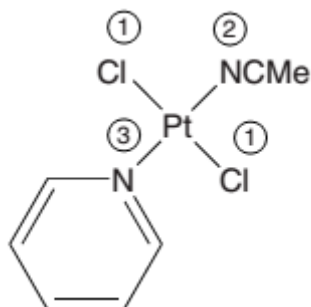
Wskaźnik konfiguracyjny dla układu kwadratowego umieszcza się za symbolem wielościanu (SP-4). Jest pojedynczą cyfrą, która stanowi liczbę pierwszeństwa dla koordynującego atomu będącego w pozycji *trans* do koordynującego atomu o liczbie pierwszeństwa 1, czyli liczbą pierwszeństwa koordynującego atomu będącego w pozycji *trans* do najbardziej uprzywilejowanego koordynującego atomu (o najwyższych starszeństwie).

Przykłady:

1. Kolejność pierwszeństwa: a>b>c>d  
Kolejność liczb pierwszeństwa: 1 <2<3<4



2.

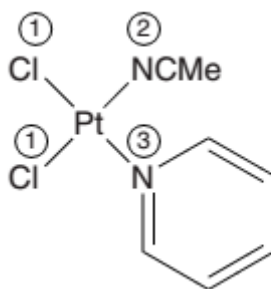


(*SP-4-1*)-(acetonitril)dichlorido(pirydyna)platyna(II)

Jeżeli występują dwie możliwości, tak jak w Przykładzie 3, wskaźnik konfiguracyjny jest liczbą pierwszeństwa o wyższej wartości liczbowej. Zarówno ligand o liczbie pierwszeństwa 2 (acetonitril) oraz ligand o liczbie pierwszeństwa 3 (pirydyna) znajdują się w pozycji *trans* do liganda o liczbie pierwszeństwa 1 (chlorek). Jako wskaźnik konfiguracyjny wybierana jest najwyższa wartość liczbowo (3). Wybór ten podyktowany jest czasem jako zgodny z regułą maksymalnej różnicy liczb pierwszeństwa w pozycja *trans*, tj. różnica pomiędzy wartościami liczbowymi związanymi z liczbami pierwszeństwa danych ligandów powinna być możliwie jak największa.

Przykład:

3.



(SP-4-3)-(acetonitril)dichlorido(pirydyna)platyna(II)

#### IR-9.3.3.4 Oktaedryczne układy koordynacyjne (OC-6)

Przedrostki *cis* oraz *trans* są powszechnie używane w celu rozróżnienia stereoizomerów oktaedrycznych układów koordynacyjnych typu  $[Ma_2b_4]$  (oraz w niektórych podobnych układach), gdzie M jest atomem centralnym, natomiast "a" i "b" są różnymi rodzajami koordynujących atomów. Atomy donorowe "a" zajmują sąsiadujące położenia koordynacyjne w izomerze *cis* (sąsiednie wierzchołki oktaedru), w izomerze *trans* natomiast przeciwne (Przykład 1).

W celu rozróżnienia stereoizomerów w układach typu  $[Ma_3b_3]$  często używa się terminów *mer* (meridional) oraz *fac* (facial). W przypadku izomeru typu *mer* (Przykład 2), dwie grupy trzech takich samych atomów donorowych znajdują się na "południku" oktaedru, w płaszczyźnie zawierającej także atom centralny (grupa trzech takich samych atomów donorowych wraz z atomem centralnym znajdują się w tej samej płaszczyźnie). W izomerze *fac* (Przykład 3) każda z dwóch grup jednakowych atomów donorowych obsadza wierzchołki tej samej ściany oktaedru.

Wskaźnik konfiguracyjny oktaedrycznego układu pisany jest za symbolem odpowiadającego mu wielościanu (OC-6) i składa się z dwóch cyfr.

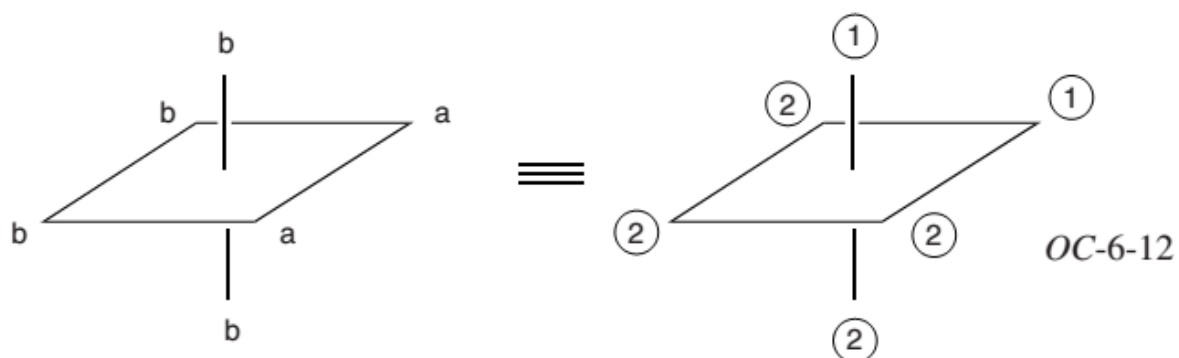
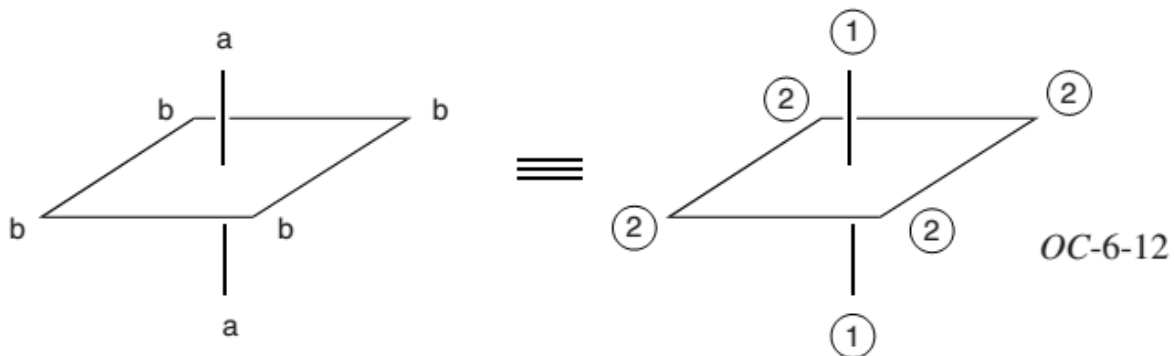
Pierwsza cyfra jest liczbą pierwszeństwa atomu donorowego będącego w pozycji *trans* do atomu donorowego o liczbie pierwszeństwa 1, czyli liczbą pierwszeństwa koordynującego atomu będącego w pozycji *trans* do najbardziej uprzywilejowanego koordynującego atomu (o najwyższych starszeństwie). Jeżeli w układzie występuje więcej niż jeden atom koordynujący o liczbie pierwszeństwa 1, pierwszą cyfrą wskaźnika konfiguracyjnego jest liczba pierwszeństwa będącego w pozycji *trans* liganda o najwyższej wartości liczbowej (należy pamiętać, że liczby oznaczone znakiem prim posiadają wyższą(?) wartość liczbową niż odpowiadające im liczby tym znakiem nieoznaczone).

Wybrane w ten sposób dwa koordynujące atomy (atom z przypisaną liczbą pierwszeństwa 1 oraz atom będący do niego w pozycji *trans*), określają oś odniesienia oktaedru.

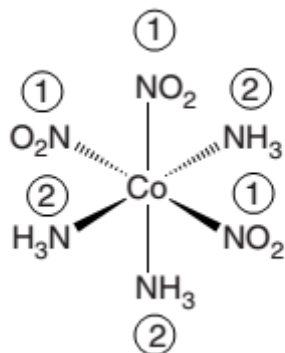
Druga cyfra wskaźnika konfiguracyjnego jest liczbą pierwszeństwa atomu donorowego będącego w pozycji *trans* do najbardziej uprzywilejowanego koordynującego atomu w płaszczyźnie w płaszczyźnie prostopadłej do osi odniesienia. Wybierana jest liczba pierwszeństwa atomu będącego w pozycji *trans* o najwyższej wartości liczbowej.

Przykłady:

1.

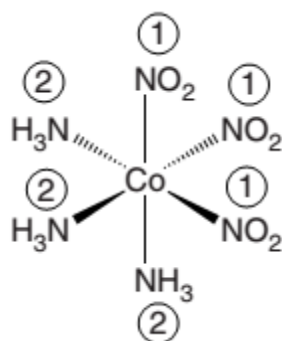


2.



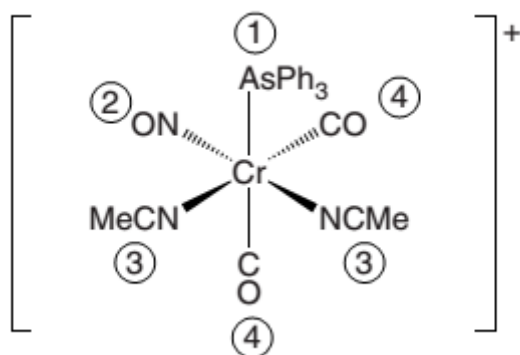
*mer*-[Co(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]  
 (OC-6-21)-traaminatriazotano(III)-κ<sup>3</sup>N-kobalt(III)

3.



*mer*-[Co(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]  
(OC-6-22)-traaminatriazotano(III)-κ<sup>3</sup>N-kobalt(III)

4.



(OC-6-43)-bis(acetonitryl)dikarbonylonitrozyl(trifenylloarsyna)chrom(1+)

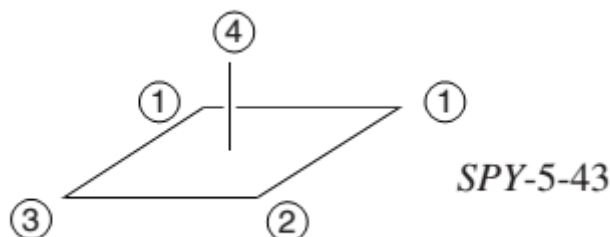
### IR-9.3.3.5 Układy koordynacyjne o geometrii piramidy o podstawie kwadratu (*SPY-4*, *SPY-5*)

Wskaźnik konfiguracyjny układu *SPY-5* składa się z dwóch cyfr. Pierwszą cyfrą jest liczba pierwszeństwa atomu donorowego położonego na osi symetrii C<sub>4</sub> idealnej piramidy. Drugą cyfrą jest liczbą pierwszeństwa atomu donorowego będącego w pozycji *trans* do koordynującego atomu o najniższej liczbie pierwszeństwa znajdującego się w płaszczyźnie prostopadłej do osi symetrii C<sub>4</sub>. Jeżeli w prostopadłej płaszczyźnie obecnych jest więcej niż jeden taki atom, druga cyfra wybierana jest jako ta, która posiada najwyższą wartość liczbową.

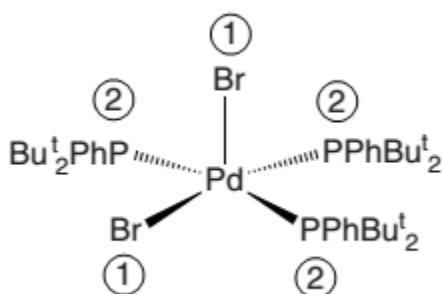
Wskaźnik konfiguracyjny układu *SPY-4* jest pojedynczą cyfrą, która wybierana jest w ten sam sposób jak druga cyfra dla układu *SPY-5*. Wskaźnik konfiguracyjny czterokoordynacyjnego układu o geometrii piramidy o podstawie kwadratu będzie więc taki sam jak dla układu o strukturze kwadratowej, która wynika ze współpłaszczyznowych położenia ligandów oraz atomu centralnego. Różnica między tymi układami opisywana jest przez symbol wielościanu, nie przez wskaźnik konfiguracyjny.

Przykłady:

1.



2.



(*SPY-5-12*)-dibromidotris[di-*tert*-butylo(fenylo)fosfano]pallad

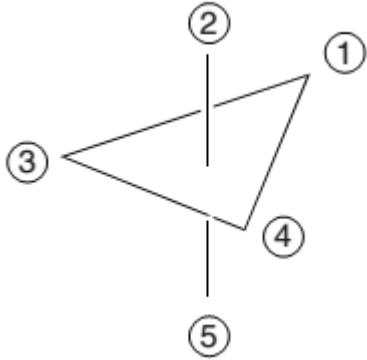
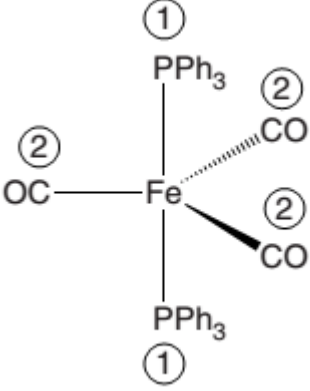
### IR-9.3.3.6 Układy koordynacyjne o geometrii bipiramidy (*TBPY-5*, *PBPY-7*, *HBPY-8* i *HBPY-9*)

Wskaźnik konfiguracyjny układów koordynacyjnych o geometrii bipiramidy zapisywany jest za odpowiednim symbolem wielościanu i składa się z dwóch części oddzielonych łącznikiem, za wyjątkiem układów o geometrii bipiramidy trygonalnej w których przypadku zapis drugiej części nie jest konieczny i z tego powodu jest ona pomijana. Pierwsza część zawiera dwie cyfry, określające liczby pierwszeństwa atomów donorowych położonych na osi symetrii o najwyższej krotności, będącą osią odniesienia. Niższą liczbę podaje się jako pierwszą.

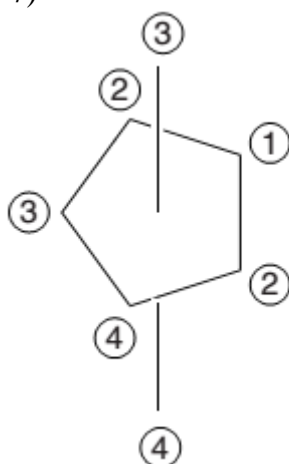
Druga część składa się z liczb pierwszeństwa atomów donorowych znajdujących się w płaszczyźnie prostopadłej do osi odniesienia. Pierwsza cyfra określa liczbę pierwszeństwa uprzywilejowanego atomu donorowego, tj. atomu o najniższej liczbie pierwszeństwa na płaszczyźnie. Pozostałe liczby pierwszeństwa wymienia się wg kolejności zgodnej albo przeciwnej do ruchu wskazówek zegara, w zależności od tego, który kierunek daje niższą liczbową kolejność. Najniższa liczbowa kolejność to taka, która posiada najniższą liczbę na pierwszej pozycji różniącej oba zestawy, kiedy dane zestawy porównywane są liczba po liczbie od jednego końca do drugiego.

Przykłady:

1. Bipiramida trygonalna (*TBPY-5*)

	
<p><i>TBPY-5-25</i></p>	<p>(<i>TBPY-5-11</i>)- trikarbonylbis(trifenylfosfan)żelazo</p>

## 2. Bipiramida pentagonalna (*PBPY-7*)



*PBPY-7-34-12342* (nie 12432)

### IR-9.3.3.7 Układy T-kształtne (*TS-3*)

Wskaźnik konfiguracyjny układów T-kształtnych zapisywany jest za symbolem wielościanu i składa się z jednej cyfry, która jest liczbą pierwszeństwa koordynującego atomu leżącego na "pniu" układu T (jako przeciwnego do "poprzeczki" układu T).

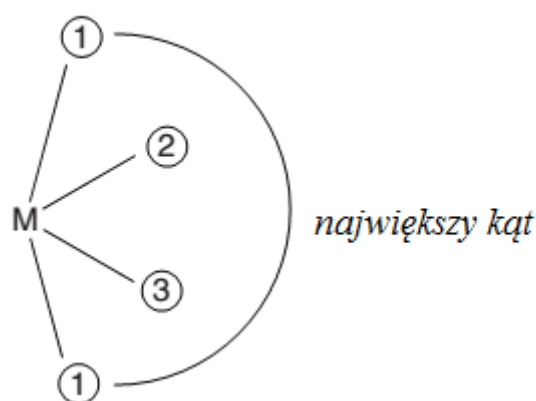
### IR-9.3.3.8 Układy typu podparta deska

Wskaźnik konfiguracyjny układów o geometrii podpartej deski składa się z dwóch cyfr, będących liczbami pierwszeństwa dwóch koordynujących atomów, między którymi występuje największy kąt. Liczba pierwszeństwa o niższej wartości liczbowej zapisywana jest jako pierwsza.



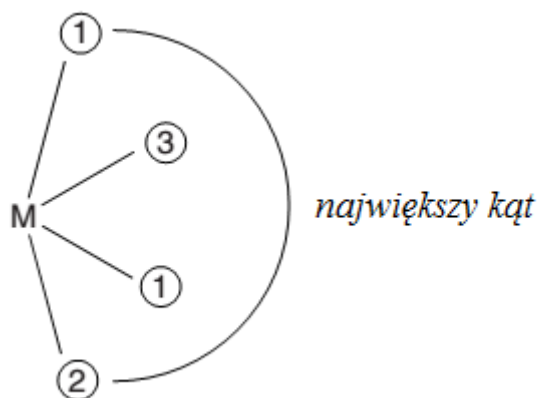
Przykłady:

1.



SS-4-11

2.



SS-4-12

### IR-9.3.4 Opis konfiguracji absolutnej - rozróżnienie diastereoizomerów

#### IR-9.3.4.1 Wiadomości wstępne

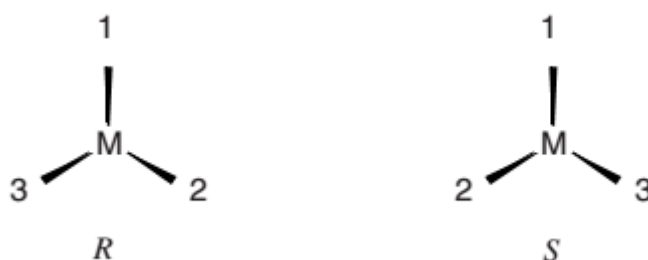
Istnieją dwa dobrze opracowane, różniące się jednak od siebie zasadniczo, systemy pozwalające odróżnić od siebie poszczególne enancjomery (stereoizomery będące względem siebie odbiciami lustrzanymi). Pierwszy z nich oparty jest na konstytucji związku chemicznego i wykorzystuje konwencje R/S używaną do opisu centrów tetraedrycznych oraz blisko związaną konwencję C/A używaną do opisu innych wielościanów. Konwencje R/S oraz C/A opierają się na kolejności pierwszeństwa (Podrozdział IR-9.3.3.2 oraz IR-9.3.5, w którym zawarto bardziej szczegóły jej opis), w której koordynującym atomom przypisuje się liczby pierwszeństwa oparte (zazwyczaj) na ich liczbach atomowych oraz ich podstawnikach.

Drugi system jest oparty na geometrii cząsteczki i opiera się na konwencji skośnych prostych, którą stosuje się do jednostek koordynacyjnych oktaedrycznych. W tym systemie, poszczególne dwa enancjomery określa się za pomocą symboli  $\Delta$  oraz  $\Lambda$ . Nomenklatura oparta na konwencji C/A nie jest zalecana dla chelatowych jednostek koordynacyjnych, w których przypadku konwencja skośnych prostych jest całkowicie niejednoznaczna (Podrozdziały od IR-9.3.4.11 do IR-9.3.4.14).

### IR-9.3.4.2 Konwencja R/S dla centrów tetraedrycznych

Konwencja używana do opisu konfiguracji absolutnej centrów tetraedrycznych została pierwotnie opracowana dla związków zawierających centra w postaci atomów węgla (Rozdział P-91 pozycji podanej w odnośniku 1 oraz pozycja podana w odnośniku 13). Metodę tę można jednak stosować do dowolnych centrów tetraedrycznych. Zmiana reguł tej metody w celu stosowania jej do tetraedrycznych jednostek koordynacyjnych nie jest konieczna.

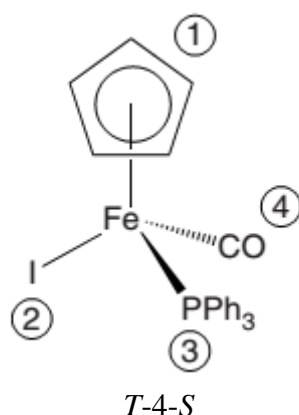
Symbol R przypisywany jest wówczas, gdy kolejność liczb pierwszeństwa, rozpoczynając od liczby odpowiadającej najwyższemu pierwszeństwu, jest zgodna z ruchem wskazówek zegara (patrząc wzdłuż wektora skierowanego od atomu centralnego do podstawnika o najmniejszym pierwszeństwie (podstawnik, którego liczba pierwszeństwa posiada najwyższą wartość liczbową). Odwrotna kolejność (przeciwna do ruchu wskazówek zegara) prowadzi do symbolu S.



System ten najczęściej stosowany jest w przypadku chiralności liganda, można go jednak równie dobrze zastosować do centrów tetraedrycznych jednostek koordynacyjnych metali. System ten znalazł także zastosowanie w przypadku pseudotetraedrycznych związków metaloorganicznych w których, na przykład, ligandy cyklopentadienylowe traktuje się jak ligandy jednokleszczowe o dużym priorytecie.

Przykład:

1.



### IR-9.3.4.3 Konwencja R/S dla centrów o strukturze bipiramidy trygonalnej

Cząsteczki zawierające centra o strukturze bipiramidy trygonalnej (TPY-3) mogą istnieć jako pary stereoizomerów. Konfiguracja takich centrów może zostać opisana w podobny sposób jak dla przypadku centrów tetraedrycznych. W tym celu wprowadza się fikcyjny tzw. "atom fantomowy" posiadający niskie pierwszeństwo, który zostaje umieszczony w położeniu

koordynacyjnym umożliwiającym utworzenie centrum tetraedrycznego (z centrum o strukturze bipiramidy trygonalnej). Następnie, centrum takie może zostać opisane poprzez zastosowanie konwencji R/S w taki sam sposób, jak zwykle centra tetraedryczne.

Użycie pewnych teorii wiązań prowadzi do umieszczenia w centrum o strukturze bipiramidy trygonalnej wolnej pary elektronowej. Jeżeli sytuacja taka ma miejsce, konfiguracja absolutna takiego centrum także opisywana przez zastosowanie konwencji R/S, umieszczając "atom fantomowy" w położeniu wolnej pary elektronowej. Przykłady stosowania tej metody znaleźć można w opisie konfiguracji absolutnej sulfotlenków zawierających różne podstawniki alkilowe.

#### **IR-9.3.4.4 Konwencja C/A dla centrów o strukturze innych wielościanów**

W przypadku konwencji R/S w celu określenia chiralności danego układu używa się liczb pierwszeństwa, tak jak opisano to w poprzednich rozdziałach. Te same zasady mogą zostać łatwo zastosowane do geometrii innych niż tetraedryczne. W celu uniknięcia niejednoznaczności, oraz podkreślenia specyficznych aspektów systemu kolejności opartego na liczbach pierwszeństwa stosowanego do wielościanów koordynacyjnych, symbole R i S zastępuje się w przypadku innych wielościanów symbolami C oraz A.

Procedurę określania pierwszeństwa koordynujących atomów opisano szczegółowo w Podrozdziale IR-9.3.5. Po wyznaczeniu pierwszeństwa danych atomów, wyróżnia się odpowiednią dla danej geometrii oś odniesienia (oraz kierunek). Następnie, rozpatruje się liczby pierwszeństwa koordynujących atomów znajdujących się w płaszczyźnie prostopadłej do wyróżnionej osi odniesienia, patrząc od strony koordynującego atomu osiowego o najwyższym pierwszeństwie.

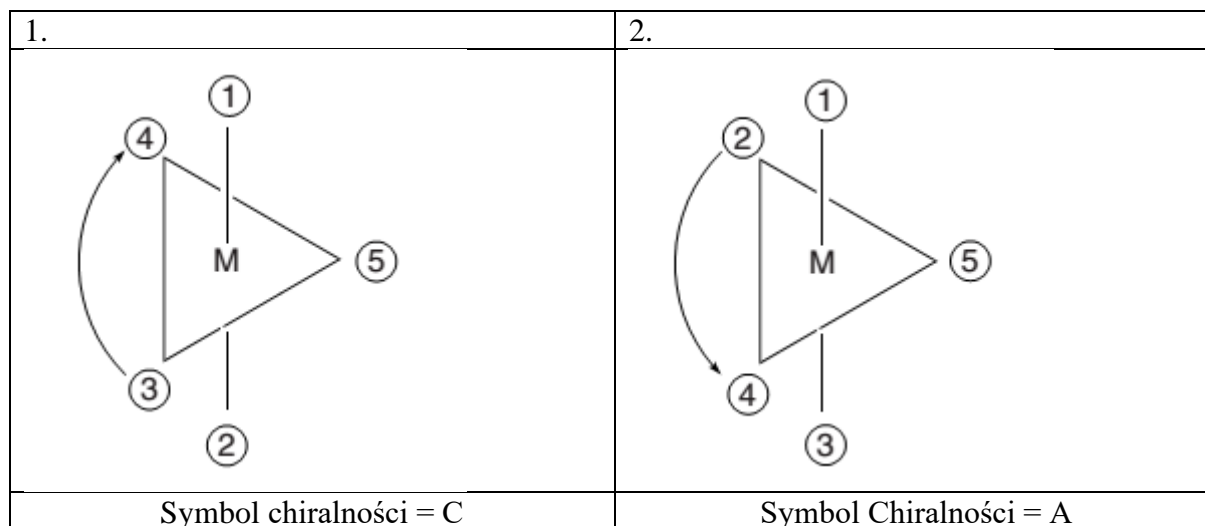
Rozpoczynając od atomu o najwyższym pierwszeństwie, znajdującego się w prostopadłej do osi odniesienia płaszczyźnie, określa się kolejność liczb pierwszeństwa. Kolejność tę wyznacza się zgodnie, oraz niezgodnie z ruchem wskazówek zegara. Otrzymane w ten sposób kolejności liczb porównuje się ze sobą i wybiera się kolejność, która posiada najniższą liczbę na pierwszej pozycji różniącej oba zestawy liczb. Jeżeli wybrana kolejność wyznaczona została w oparciu o ruch zgodny z ruchem wskazówek zegara, chiralność struktury oznaczona zostaje symbolem C. Jeżeli kolejność wynika z ruchu przeciwnego do ruchu wskazówek zegara chiralność układu oznaczona zostaje symbolem A.

#### **IR-9.3.4.5 Konwencja C/A dla centrów o strukturze bipiramidy trygonalnej**

Stosowana w tym przypadku procedura jest podobna do tej używanej dla układów tetraedrycznych (konwencja R/S). Jest ona jednak zmodyfikowana ze względu na obecność wyróżnionej dla tego układu osi odniesienia przechodzącej przez dwa osiowe atomy donorowe oraz atom centralny.

Strukturę tego układu ustawia się tak, by patrząc wzdłuż osi odniesienia, atom donorowy o wyższym pierwszeństwie (posiadający liczbę pierwszeństwa o mniejszej wartości liczbowej) znajdował się bliżej. Stosując się do powyższego, atom donorowy o niższym priorytecie będzie znajdował się (względem patrzącego) za atomem centralnym. Stosując taką orientację układu, analizuje się kolejność pierwszeństwa koordynujących atomów znajdujących się w płaszczyźnie trójkąta. Jeżeli kolejność pierwszeństwa od atomu o najwyższym pierwszeństwie do atomu o najniższym pierwszeństwie jest zgodna z kierunkiem ruchu wskazówek, chiralność układu oznaczona zostaje symbolem C. W innym przypadku, tj. jeżeli kolejność wynika z ruchu przeciwnego do ruchu wskazówek zegara, chiralność układu oznaczona zostaje symbolem A.

Przykłady:

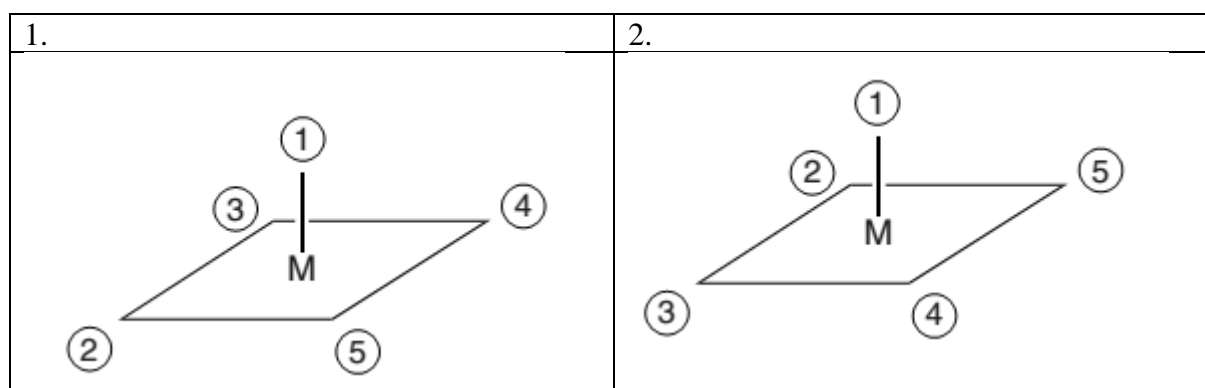


#### IR-9.3.4.6 Konwencja C/A dla centrów o strukturze piramidy o podstawie kwadratu

Dla struktur piramidy o podstawie kwadratu stosuje się procedurę podobną do tej opisanej w Podrozdziale IR-9.3.4.4. W przypadku układów *SPY-5*, wielościan orientuje się w taki sposób, aby patrzący patrzył na układ wzdłuż osi  $C_4$ , od liganda osiowego w stronę atomu centralnego. Stosując taką orientację układu, analizuje się kolejność pierwszeństwa koordynujących atomów znajdujących się w prostopadłej do wybranej osi płaszczyźnie. Jeżeli kolejność pierwszeństwa od atomu o najwyższym pierwszeństwie do atomu o najniższym pierwszeństwie jest zgodna z kierunkiem ruchu wskazówek zegara, chiralność układu oznaczona zostaje symbolem C. W innym przypadku, tj. jeżeli kolejność wynika z ruchu przeciwnego do ruchu wskazówek zegara, chiralność układu oznaczona zostaje symbolem A.

Chiralność układów *SPY-4* wyznacza się w podobny sposób. W tym przypadku, patrzący patrzy na układ wzdłuż osi  $C_4$  w taki sposób, by ligandy znajdowały się dalej niż atom centralny. Następnie, w celu oznaczenia układu symbolem C lub A, wyznacza się kolejność liczb pierwszeństwa w taki sam sposób jak dla układu *SPY-5*.

Przykłady:



Symbol chiralności = C

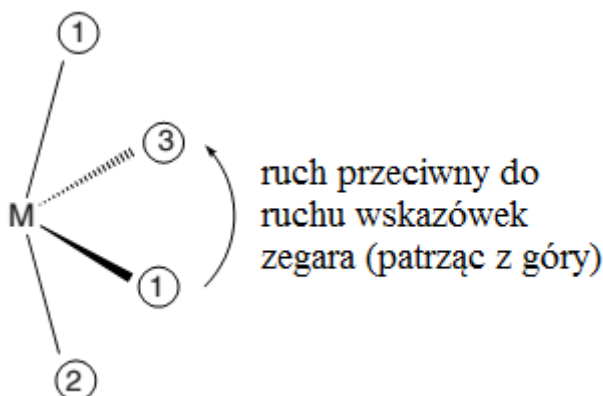
Symbol Chiralności = A

### IR-9.3.4.7 Konwencja C/A dla centrów o strukturze podpartej deski

Konfiguracja absolutna jednostek koordynacyjnych o strukturze podpartej deski może być opisana przy użyciu konwencji C/A. Wskaźnik konfiguracyjnych układów o strukturze podpartej deski składa się z dwóch cyfr - liczb pierwszeństwa dwóch ligandów oddzielonych największym kątem. Spośród tych dwóch ligandów, wybierany zostaje ligand posiadający wyższe pierwszeństwo. Jest on następnie używany jako punkt, względem którego rozpatruje się dwa pozostałe ligandy niebędące brane pod uwagę przy wyznaczeniu wskaźnika konfiguracyjnego. Jeżeli ruch od liganda o wyższym pierwszeństwie do liganda o niższym pierwszeństwie (wybierając mniejszy kąt) wiąże się z kierunkiem zgodnym z ruchem wskazówek zegara, absolutna konfiguracja układu oznaczona zostaje symbolem C. W przeciwnym wypadku, konfiguracja absolutna układu oznaczona zostaje symbolem A.

Przykład:

1.



SS-4-12-A

### IR-9.3.4.8 Konwencja C/A dla centrów oktaedrycznych

Konfiguracja absolutna niektórych oktaedrycznych jednostek koordynacyjnych może być opisana zarówno za pomocą konwencji skośnych prostych (Podrozdział IR-9.3.4.11) jak i systemu C/A. Częściej używana jest metoda pierwsza, jednakże system oparty na konwencji C/A jest bardziej ogólny i z tego powodu znajduje zastosowanie do większości jednostek koordynacyjnych. System oparty na konwencji skośnych prostych znajduje zastosowanie jedynie do układów tris(didentnych), bis(didentnych) oraz do układów blisko z nimi związanymi.

Ośią odniesienia dla układów oktaedrycznych jest oś zawierająca atom donorowy, którego pierwszeństwo przez zastosowanie reguł CIP wynosi 1, oraz znajdujący się do niego w pozycji *trans* atom donorowy o możliwie najniższym pierwszeństwie (z liczbą pierwszeństwa o najwyższej wartości liczbowej) (Podrozdział IR-9.3.3.4). Liczby pierwszeństwa atomów znajdujących się w prostopadłej do osi odniesienia płaszczyźnie rozpatruje się patrząc od strony koordynującego atomu o najwyższym pierwszeństwie (pierwszeństwie według reguł CIP wynoszącym 1). Następnie porównuje się kolejność liczb pierwszeństwa otrzymaną z ruchem zgodnym ze wskazówkami zegara z kolejną otrzymaną z ruchem przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Chiralność układu oznacza się za pomocą symbolu C bądź A w zależności

od tego, która z kolejności liczb pierwszeństwa posiada najniższą liczbę na pierwszej pozycji różniącej oba zestawy.

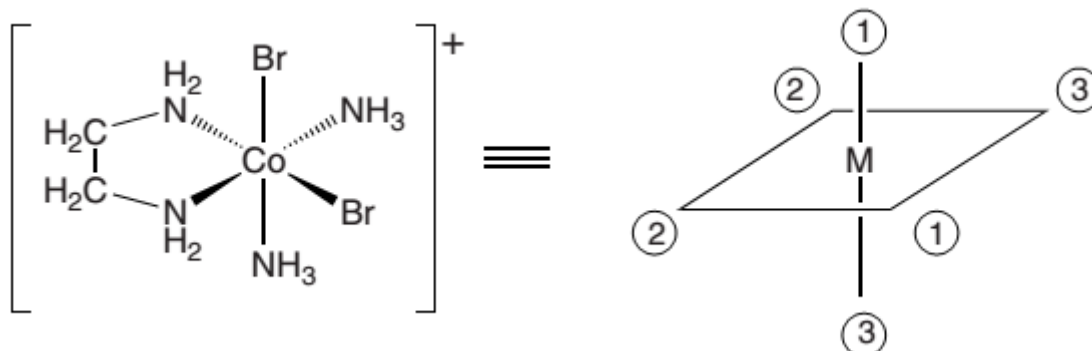
Przykłady:

1.	2.	3.
Symbol chiralności = C	Symbol chiralności = A	Symbol chiralności = C

Przykład 4 przedstawia układ  $[\text{CoBr}_2(\text{NH}_3)_2(\text{en})]^+$ , którego symbol wielościanu to OC-6, a wskaźnik konfiguracyjny to 32. Symbolem chiralności jest C.

Przykład:

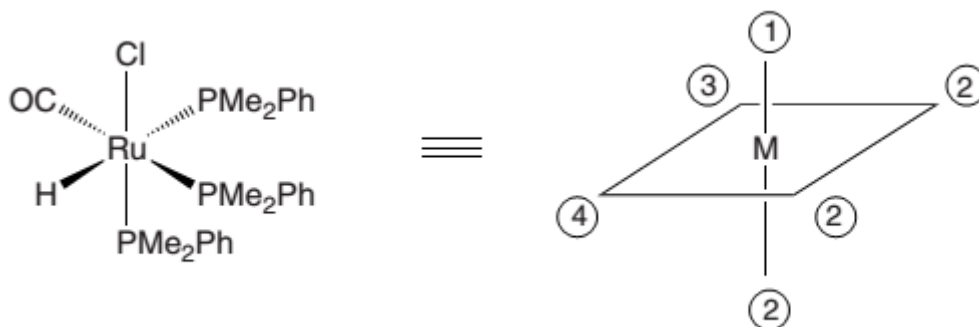
4.



Przykład 5 przedstawia układ  $[\text{Ru}(\text{CO})\text{Cl}(\text{H})(\text{PMe}_2\text{Ph})_3]$  o deskrypcie stereochemicznej OC-6-24-A. Liczba pierwszeństwa liganda chlorkowego jest równe 1.

Przykład:

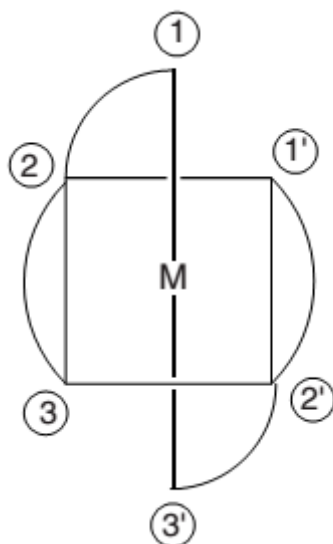
5.



Zastosowanie konwencji *C/A* dla ligandów wielokleszczowych zilustrowano na Przykładzie 6. W tym wypadku stosuje się konwencję znaków "prim" opisaną w Podrozdziale IR-9.3.5. Liczba pierwszeństwa 2 posiada wyższe pierwszeństwo niż 2'.

Przykład.

6.



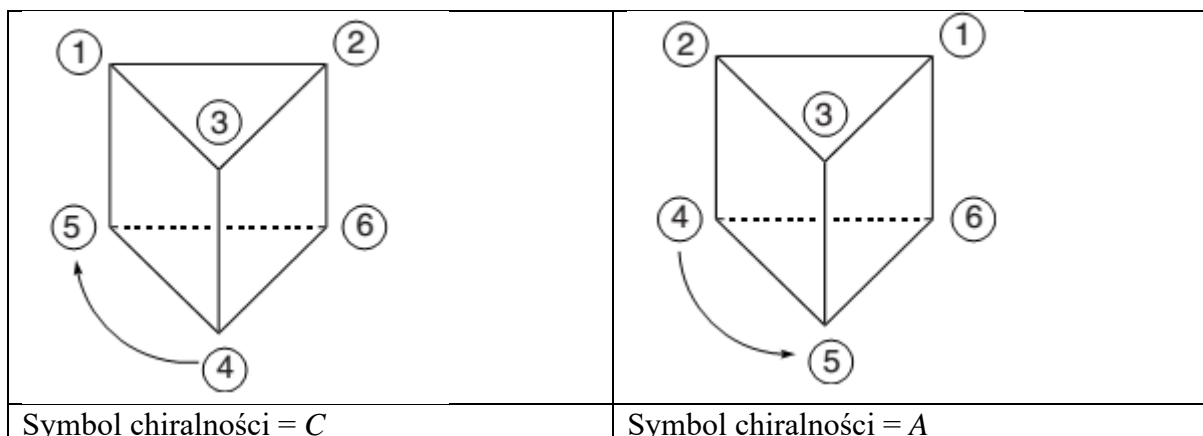
Symbol chiralności = A

#### IR-9.3.4.9 Konwencja *C/A* dla centrów o strukturze słupa trygonalnego

Dla układu o strukturze słupa trygonalnego wskaźnik konfiguracyjny wyprowadza się z liczb pierwszeństwa CIP koordynujących atomów leżących naprzeciw trójkątnej ściany, która zawiera najwięcej atomów o najwyższym pierwszeństwie CIP. Symbol chiralności określa się patrząc na słup trygonalny od strony wyróżnionej trójkątnej ściany. Następnie uwzględnia się kolejność liczb pierwszeństwa atomów znajdujących się na mniej uprzywilejowanej (przeciwnej) ścianie.

Przykłady:

1.	2.
----	----

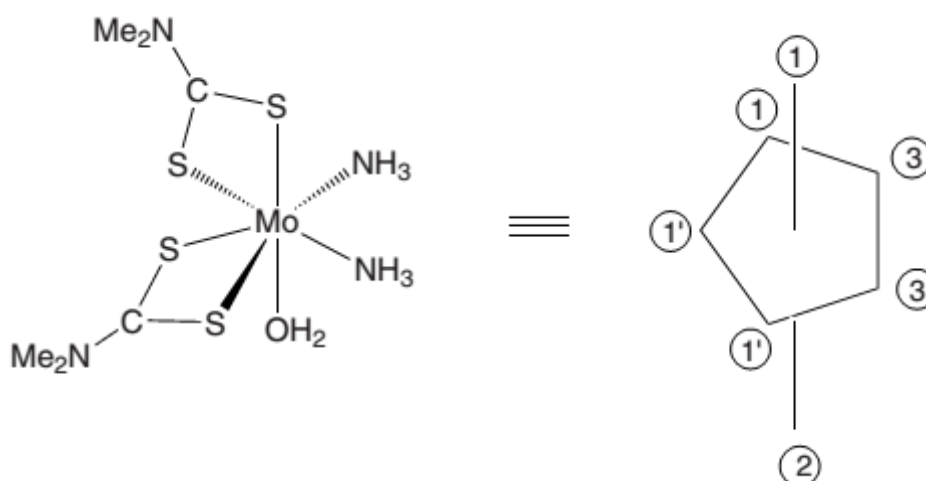


#### IR-9.3.4.10 Konwencja *C/A* dla innych centrów o strukturze bipiramidy

Procedura stosowana do układu o strukturze bipiramidy trygonalnej jest odpowiednia również dla innych struktur o geometrii bipiramidy. Danemu układowi przypisuje się symbol *C* lub *A* w zależności od tego, która kolejność liczb pierwszeństwa (ustalona według kierunku zgodnego z kierunkiem ruchu wskazówek zegara czy ustalona według kierunku przeciwnego z kierunkiem ruchu wskazówek zegara) posiada najniższą liczbę na pierwszej pozycji różniącej oba zestawy liczb (Podrozdział IR-9.3.4.5 oraz IR-9.3.4.6). Strukturę układu ustawia się tak, by patrząc wzdłuż osi odniesienia, atom donorowy o wyższym pierwszeństwie (posiadający liczbę pierwszeństwa o mniejszej wartości liczbowej) znajdował się bliżej.

Przykład:

1.



*PBPY-7-12-11'1'33-A*

#### IR-9.3.4.11 Konwencja skośnych prostych

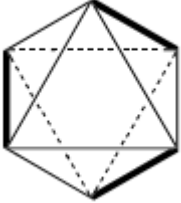
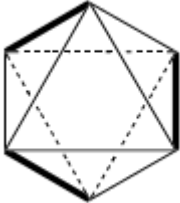
Tris(didentne) jednostki koordynacyjne stanowią rodzinę układów, w której przypadku użyteczną, oraz jednoznaczną konwencję, rozwinięto w oparciu o orientację prostych skośnych wyznaczających helisę.

Przykłady 1 oraz 2 przedstawiają formy delta ( $\Delta$ ) oraz lambda ( $\Lambda$ ) jednostki koordynacyjnej takiej jak  $[\text{Co}(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)_3]^{3+}$ . Reguły określają chiralność dwóch dodatkowych rodzin struktur. Rodzinami tymi są oktaedryczne struktury *cis*-bis(didentne) oraz



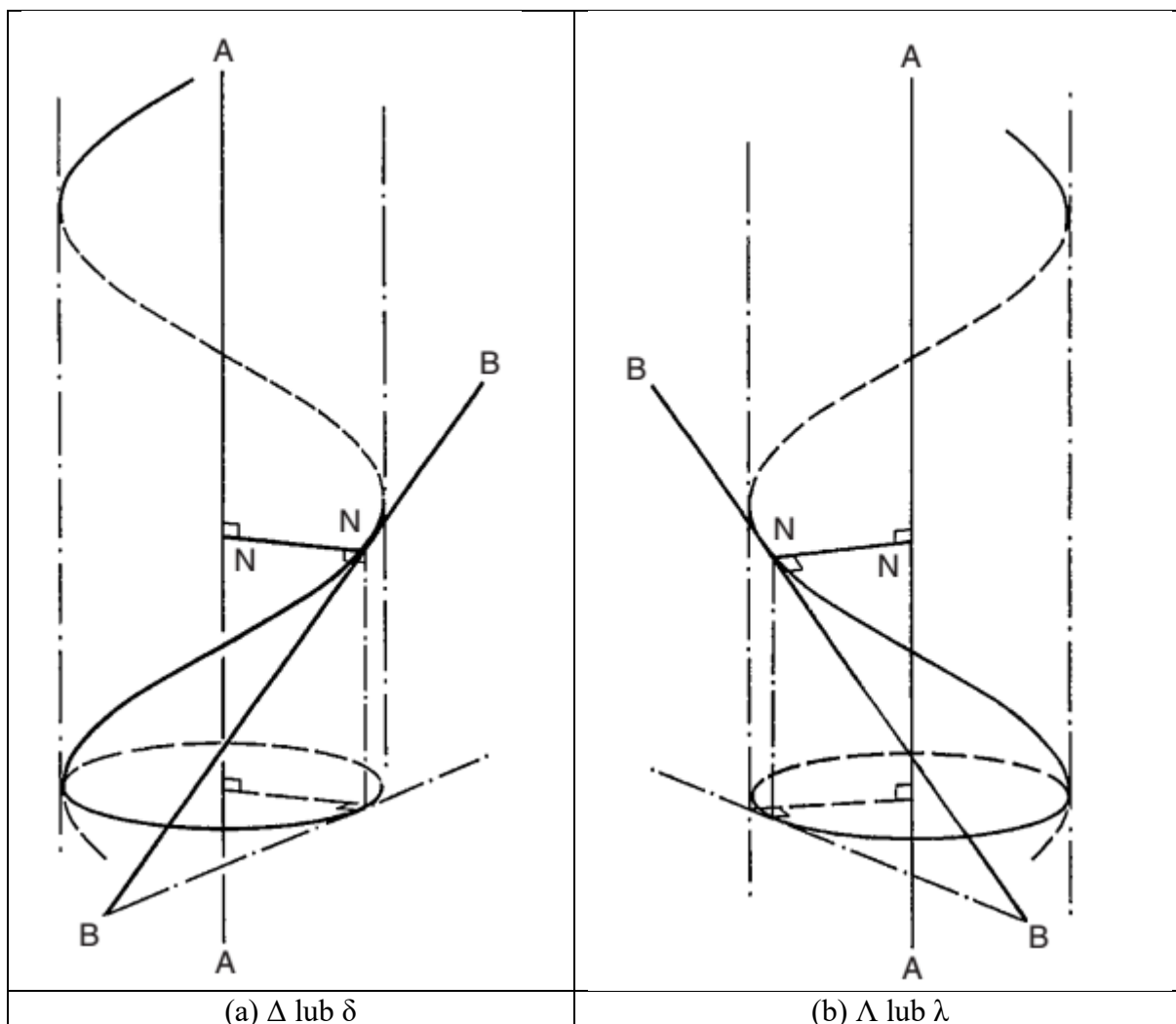
konformacje niektórych pierścieni chelatowych. System ten można również stosować do opisu jednostek koordynacyjnych z ligandami trój- i więcej kleszczowymi. Wówczas jednak należy uwzględnić dodatkowe reguły.<sup>15</sup>

Przykłady:

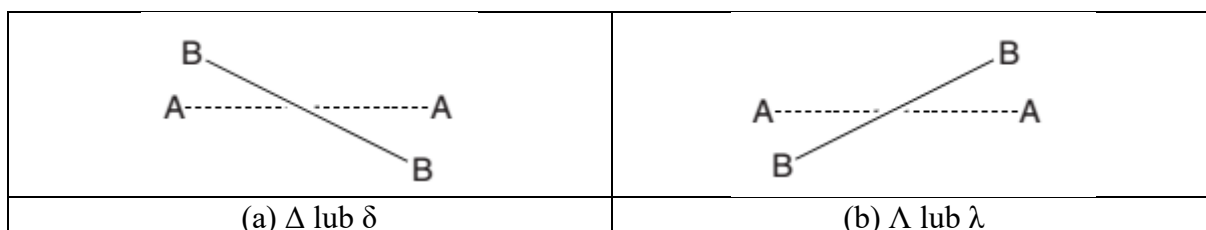
1.	2.
	
<i>delta</i> ( $\Delta$ )	<i>lambda</i> ( $\Lambda$ )

Dwie skośne proste, które nie są prostopadłe, mają cechę, którą jest posiadanie jednej, i tylko jednej, wspólnej normalnej. Określają one układ helikalny, tak jak zilustrowano to na Rysunku IR-9.1 oraz IR-9.2 (poniżej). Na rysunku IR-9.1 jedna ze skośnych prostych, AA, wyznacza oś helisy na walcu, którego promień jest równy długości wspólnej normalnej (NN), do dwóch skośnych prostych, AA oraz BB. Druga z prostych skośnych, BB, jest styczną do helisy w punkcie N i wyznacza stromość helisy. Na rysunku IR-9.2, dwie proste skośne, AA oraz BB, widoczne są w rzucie prostopadłym do ich wspólnej normalnej.

Części (a) Rysunków IR-9.1 oraz IR-9.2 przedstawiają prawoskrętną helisę powiązaną z grecką literą delta ( $\Delta$  odnosi się do konfiguracji,  $\delta$  do konformacji). Części (b) Rysunków IR-9.1 oraz IR-9.2 przedstawiają lewoskrętną helisę powiązaną z grecką literą lambda ( $\Lambda$  odnosi się do konfiguracji,  $\lambda$  do konformacji). W związku z symetrią układu, helisa, którą pierwsza linia (np. przyjmując za tę linię BB) wyznacza wokół drugiej linii, AA, ma tę samą chiralność co ta, którą linia AA wyznacza wokół linii BB. W miarę jak jedna z tych linii jest obracana względem drugiej wokół linii NN, następuje inwersja gdy linie te są względem siebie równoległe bądź prostopadłe (Rysunek IR-9.1).



**Rysunek IR-9.1.** Dwie skośne proste  $AA$  i  $BB$ , które nie są prostopadłe wyznaczają układ helisy. Na rysunku,  $AA$  jest osią walca, którego promień jest wyznaczony przez wspólną normalną  $NN$  obydwu skośnych prostych skośnych. Linia  $BB$  jest styczną do wyżej opisanego walca, w punkcie przecięcia z  $NN$  i wyznacza helisę na tym walcu. Przypadki (a) oraz (b) ilustrują odpowiednio prawo- oraz lewoskrętną helisę.



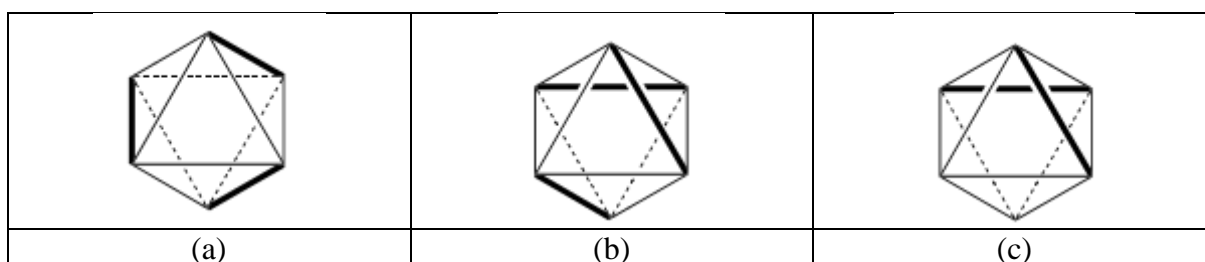
**Rysunek IR-9.2.** Rysunek przedstawia pary nieprostopadłych skośnych prostych w rzucie na płaszczyznę równoległą do obu prostych. Prosta przedstawiona za pomocą ciągłej linii ( $BB$ ) leży nad płaszczyznę papieru, prosta przedstawiona za pomocą przerywanej linii ( $AA$ ) leży poniżej tej płaszczyzny. Przypadek (a) odpowiada przypadkowi (a) na Rysunku IR-9.1 i określa prawoskrętną helisę. Przypadek (b) odpowiada przypadkowi (b) na Rysunku IR-9.1 i określa lewoskrętną helisę.

#### IR-9.3.4.12 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do oktaedrycznych tris(didentnych) jednostek koordynacyjnych

Aby wyznaczyć konfigurację tris(didentnego) układu koordynacyjnego można wybrać dowolne dwa z trzech pierścieni chelatowych. Atomy donorowe każdego pierścienia chelatowego wyznaczają prostą. Dwie takie proste dla pary pierścieni chelatowych w danej jednostce koordynacyjnej określają helisę, przy czym jedna prosta stanowi oś helisy, a druga jest styczną do helisy w punkcie przecięcia ze wspólną normalną do obu skośnych prostych. Styczna, w stosunku do osi, opisuje prawo skrętną ( $\Delta$ ) lub lewoskrętną ( $\Lambda$ ) helisę i przez to wyznacza chiralność danej konfiguracji.

#### IR-9.3.4.13 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do oktaedrycznych bis(didentnych) jednostek koordynacyjnych

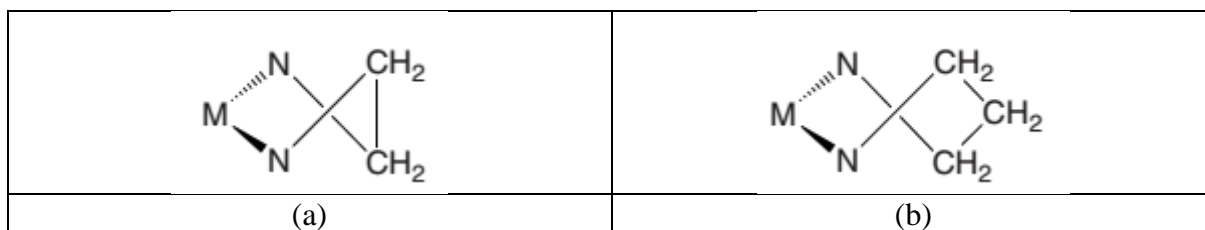
Na Rysunku IR-9.3(a) przedstawiona została typowa orientacja oktaedrycznej struktury tris(didentnej) w rzucie na płaszczyznę prostopadłą do trójkątnej osi tej struktury. Na Rysunku IR-9.3(b) przedstawiona została ta sama struktura, została jednak zorientować w taki sposób, by uwidocznic jak zależności skośnych prostych między parami pierścieni chelatowych mogą zostać użyte do określenia chiralności układu. Rysunek IR-9.3(c) przedstawia wyraźnie, że ta sama konwencja może zostać użyta do jednostki koordynacyjnej *cis*-bis(didentnej). Dwa pierścienie chelatowe wyznaczają dwie proste skośne, które z kolei określają helisę oraz chiralność układu. Postępowanie jest dokładnie takie samo jak to opisane dla układów tris(didentnych), z tą różnicą, że w tym przypadku występuje tylko jedna para pierścieni chelatowych.



**Rysunek IR-9.3.** Dwie orientacje struktury tris(didentnej), (a) i (b), pozwalające na porównanie ich chiralności z chiralnością struktury bis(didentnej) (c).

#### IR-9.3.4.14 Zastosowanie konwencji skośnych prostych do konformacji pierścieni chelatowych

W celu przypisania chiralności konformacji pierścienia, prostą AA na Rysunku IR-9.2 definiuje się jako linię łączącą dwa koordynujące atomy pierścienia chelatowego. Druga prosta, BB, jest linią łączącą dwa atomy pierścienia, które dla atomów koordynujących są sąsiednie. Te dwie skośne proste wyznaczają w zwykły sposób helisę. Styczna opisuje prawoskrętną ( $\delta$ ) lub lewoskrętną helisę ( $\lambda$ ) względem osi i tym samym określa konformację według konwencji przedstawionej na Rysunku IR-9.1. Zależności między konwencją przedstawioną na Rysunku IR-9.2, a zwykłym sposobem przedstawiania konformacji pierścienia chelatowego są widoczne porównując Rysunki IR-9.2 oraz IR-9.4.



**Rysunek IR-9.4.** Konformacja  $\delta$  pierścieni chelatowych: (a) pięcioczłonowego; (b) sześcioczłonowego

### IR-9.3.5 Określenia pierwszeństwa ligandów

#### IR-9.3.5.1 Wiadomości ogólne

Opisane w niniejszym Rozdziale metody pozwalające rozróżnić między sobą poszczególne stereoisomery wymagają przypisania atomom ligandów wiążących się bezpośrednio z atomem centralnym (tj. atomom donorowym) odpowiednich liczb pierwszeństwa. Liczby te są następnie wykorzystywane w celu wyznaczenia konfiguracji absolutnej danego związku.

Poniższe podrozdziały przedstawiają metody, których używa się w celu wyznaczenia liczb pierwszeństwa atomów donorowych oraz sposoby modyfikowania podanych reguł w celu adekwatnego opisu układów w których występują ligandy wielokleszczowe. Modyfikacje te, które składają się na konwencję stosowania znaków prim, polegają na używaniu znaków prim w celu oznaczania liczb pierwszeństwa by wskazać, które z donorowych atomów stanowią wspólną grupę danego wielokleszczowego liganda.

#### IR-9.3.5.2 Liczby pierwszeństwa

Procedura przypisania liczb pierwszeństwa w jednordzeniowych układach koordynacyjnych opiera się na standardowych regułach kolejności opracowanych dla chiralnych związków węgla przez Cahn, Ingolda i Preloga.<sup>13</sup> (Dodatkowe informacje można znaleźć w Podrozdziale P-91 pozycji podanej w odnośniku 1.) Reguły, zwane regułami CIP, mogą być dość ogólnie stosowane w celu przypisania pierwszeństwa grupom związanym z atomem centralnym.

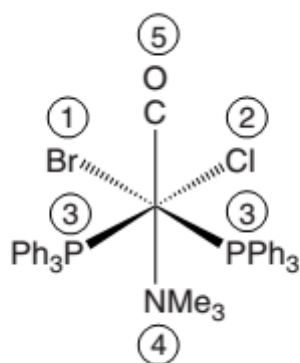
Zasada tych reguł, podczas ich stosowania do związków koordynacyjnych, opiera się na wzajemnym porównywaniu ligandów połączonych z atomem centralnym, począwszy od atomów donorowych przechodząc następnie do dalszych, zewnętrznych części, struktury. Porównywanie dokonuje się na podstawie liczb atomowych, a następnie (jeżeli jest to wymagane), porównuje się masy atomowe (np. w przypadku wyszczególnienia danych izotopów). Porównywanie może opierać się także na analizowaniu innych właściwości, taka potrzeba jest jednak na tyle rzadka, że przypadki takie nie zostały tutaj opisane.

Po zakończeniu procesu porównywania ligandów, liczby pierwszeństwa przypisywane zostają według następujących reguł:

- (i) takie same ligandy otrzymują takie liczby pierwszeństwa
- (ii) ligand (bądź ligandy) z największym pierwszeństwem otrzymuje liczbę pierwszeństwa 1; ligand o kolejnym najwyższym pierwszeństwie otrzymuje liczbę pierwszeństwa 2 i tak dalej.

Przykłady:

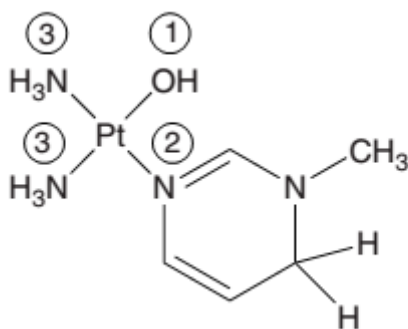
1.



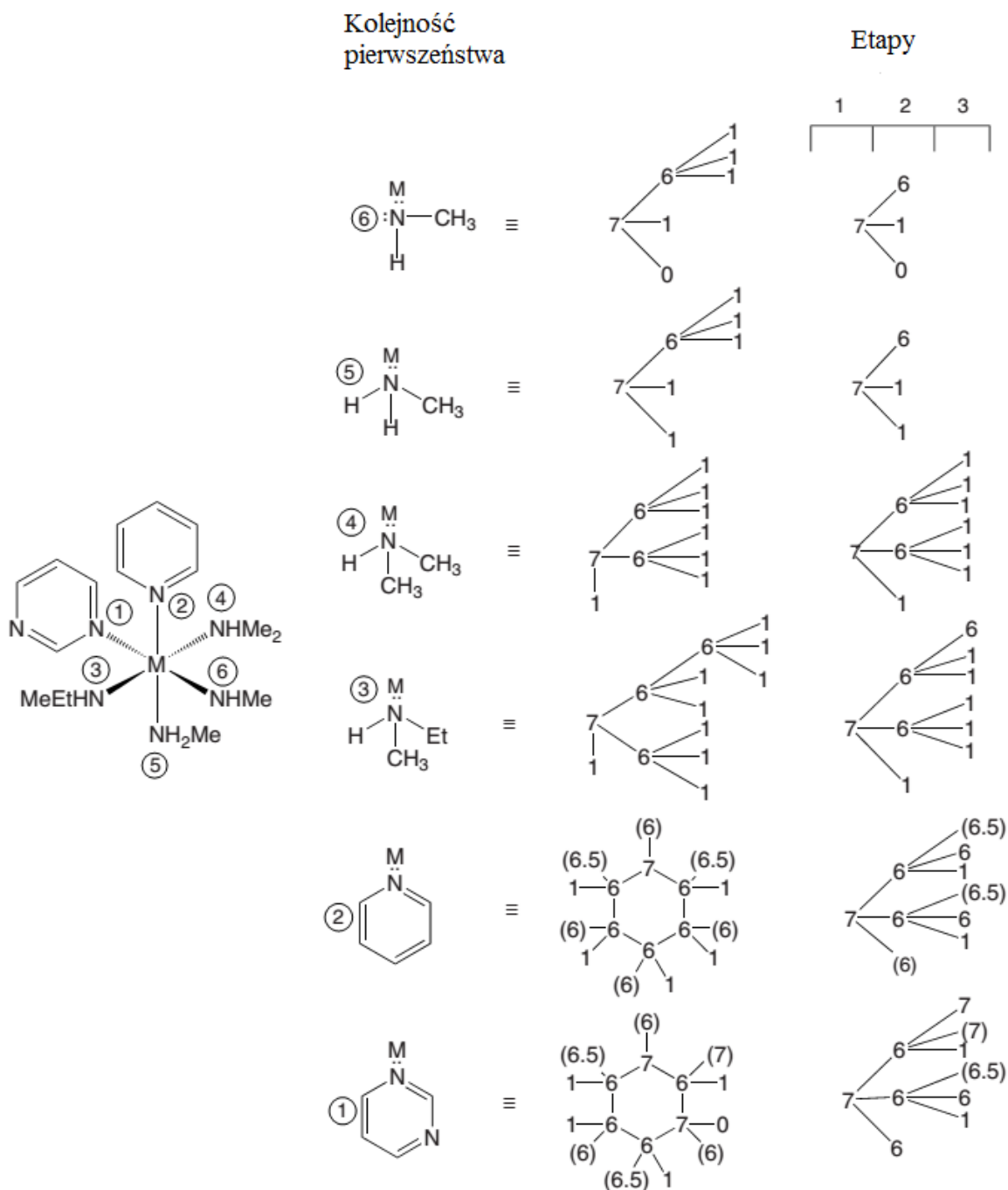
Kolejność pierwszeństwa:  $\text{Br} > \text{Cl} > \text{PPh}_3, \text{PPh}_3 > \text{NMe}_3 > \text{CO}$

Kolejność liczb pierwszeństwa:  $1 > 2 > 3, 3 > 4 > 5$

2.



W Przykładzie 2, obecny ligand heterocykliczny otrzymuje pierwszeństwo 2 ponieważ donorowy atom tego liganda posiada mniejszą liczbę atomową niż donorowe atomy OH, natomiast podstawienie tego atomu azotu klasyfikuje go wyżej, niż atom azotu  $\text{NH}_3$ .



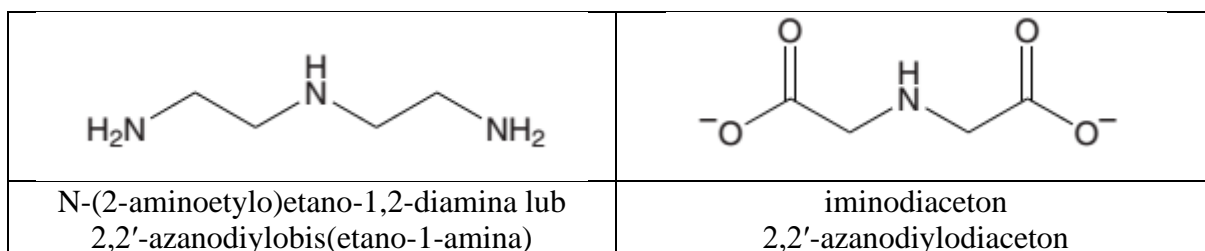
W Przykładzie 3, wszystkie koordynujące atomy są atomami azotu. Przykład ilustruje, jak poruszając się wzdłuż gałęzi składowych części danego liganda oznacza się jego pierwszeństwo. Liczby podane w kolumnach 1, 2 oraz po prawej stronie kolumny 3 są liczbami atomowymi atomów w danych strukturach, z liczbami ujętymi w nawias będącymi branymi pod uwagę w przypadku obecności wielu wiązań. Techniki uśredniania stosowane w przypadku struktur rezonansowych (dwa ostatnie ligandy na liście) są podane w cytowanym odnośniku.<sup>13</sup>

### IR-9.3.5.3 Konwencja znaków prim

Użycie konwencji znaków prim wymagane jest w celu uniknięcia niejednoznaczności używając wskaźnika konfiguracyjnego do opisu stereochemii układów, które zawierają jeden lub więcej ligandów wielokleszczowych danego rodzaju lub kiedy dany ligand wielokleszczowy zawiera więcej niż jeden, taki sam, koordynujący fragment. Sytuacja taka jest dość częsta w układach

bis(tridentnych) jednostek koordynacyjnych oraz w bardziej skomplikowanych układach. Potrzebę użycia tej konwencji przedstawiono w poniższym przykładzie.

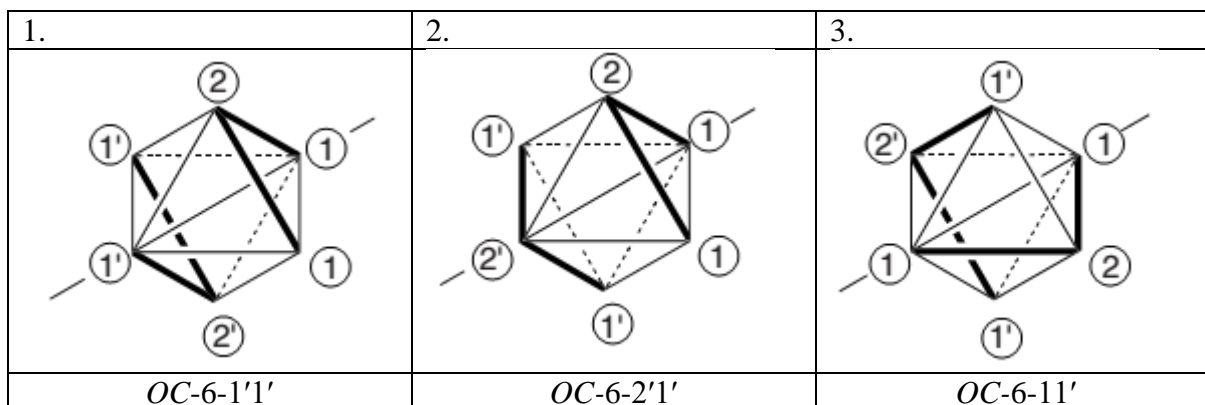
Bis(tridentna) jednostka koordynacyjna (tj. jednostka koordynacyjna o strukturze oktaedrycznej zawierająca dwa takie same tridentne liniowe ligandy) może występować w postaci form trzech stereoizomerów. Form tych jest więcej, jeżeli trójkleszczowy ligand nie posiada pewnych elementów symetrii. Trzy takie izomery, dotyczące najprostszego przypadku, przedstawiono poniżej (Przykłady 1, 2 oraz 3), razem z odpowiadającymi im symbolami wielościanów (Podrozdział IR-9.3.2.1) oraz wskaźnikami konfiguracyjnymi (Podrozdział IR-9.3.3.4). Jednostki koordynacyjne N-(2-aminoetylo)etano-1,2-diaminy oraz iminodiocjanu mogą zostać przedstawione następująco:



Potrzeba użycia konwencji znaków prim staje się dobrze widoczna podczas próby zapisu wskaźników konfiguracyjnych układów podanych w Przykładach 1 oraz 3, bez zastosowania tej konwencji. Dane dwa ligandy są identyczne i składają się z dwóch takich samych fragmentów połączonych ze sobą. Jeżeli konwencja stosowania znaków prim jest pominięta, obie jednostki koordynacyjne posiadają ten sam rozkład koordynujących atomów (cztery atomy donorowe o liczbie pierwszeństwa 1 w płaszczyźnie kwadratu oraz dwa atomy donorowe o liczbie pierwszeństwa 2, które są względem siebie w pozycji *trans*). Z tego powodu, wskaźniki konfiguracyjne tych dwóch jednostek koordynacyjnych byłyby takie same, pomimo, że opisują dwie różne jednostki koordynacyjne.

Jednym ze sposobów zaznaczenia różnicy między tymi dwoma przypadkami jest zwrócenie uwagi na to, iż w Przykładzie 1 wszystkie atomy donorowe znajdują się w pozycji *trans* do atomów donorowych, które stanowią część innego liganda. Nie jest to jednak spełnione dla Przykładu 3. Użycie znaków prim w celu wskazania ugrupowań atomów donorowych w danym ligandzie pozwala rozróżnić od siebie te dwa stereoizomery poprzez podanie ich wskaźników konfiguracyjnych.

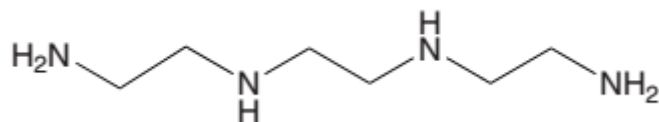
Przykłady:



Liczby pierwszeństwa jednego z ligandów są arbitralnie oznaczane znakami "prim". W opisywanej procedurze, liczba oznaczona znakiem "prim" ma niższy priorytet niż taka sama

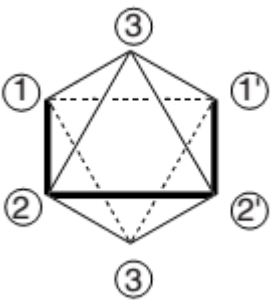
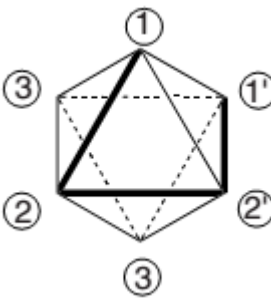
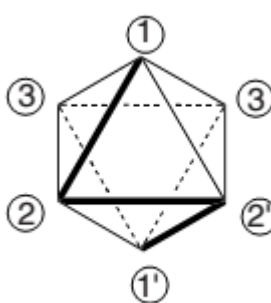
liczba pozbawiona tego znaku. Ma ona jednak wyższy priorytet niż kolejna wyższa liczba bez znaku "prim". Tak więc, 1' ma niższy priorytet niż 1, ale wyższy niż 2.

Technika ta pozwala także rozróżnić diastereoizomery związków koordynacyjnych zawierających wyższe wielokleszczowe ligandy jak to przedstawiono w Przykładach 4, 5 i 6 dla liniowego czterokleszczowego liganda takiego jak *N,N'*-bis(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina. W tym przypadku, liczby pierwszeństwa atomów donorowych odpowiadające połowie liganda czterokleszczowego zostały oznaczone znakami "prim".



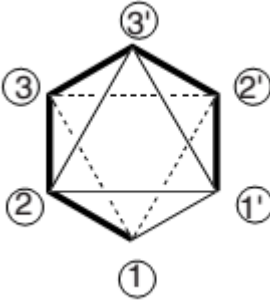
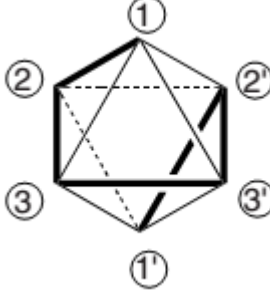
*N,N'*-bis(2-aminoetylo)etano-1,2-diamina

Przykłady:

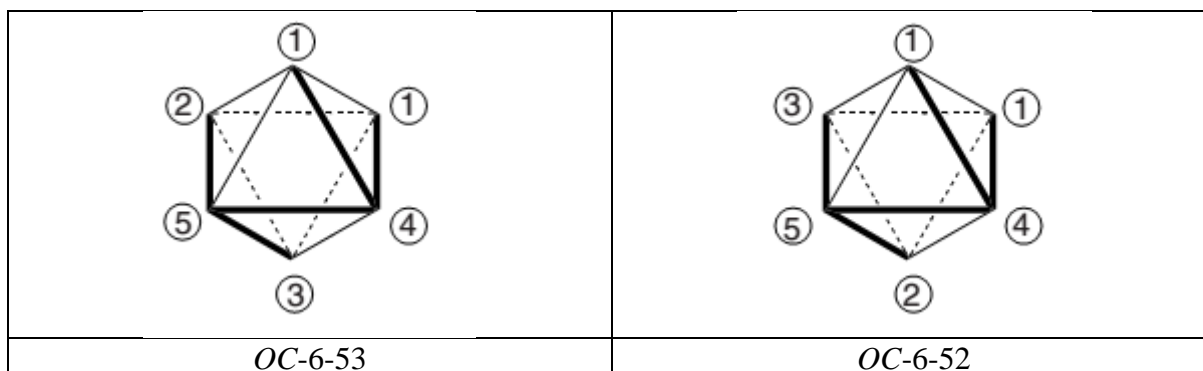
4.	5.	6.
		
<i>OC-6-2'2</i>	<i>OC-6-32</i>	<i>OC-6-1'3</i>

Ligandy pięcio- oraz sześciokleszczowe mogą być traktowane w podobny sposób. Przykłady 7 oraz 8 odnoszą się do stereoizomerów klasycznych sześciokleszczowych ligandów, podczas gdy Przykłady 9 i 10 odnoszą się do ligandów zawierających struktury rozgałęzione.

Przykłady:

7.	8.
	
<i>OC-6-3'3</i>	<i>OC-6-1'3</i>
9.	10.

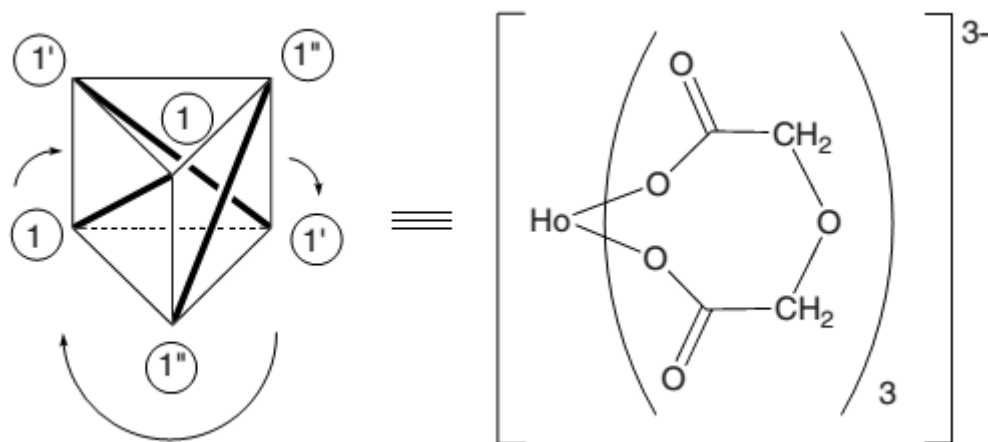




Przykład 11 przedstawia użycie konwencji znaków prim w celu przypisania konfiguracji absolutnej w strukturze nieoktaedrycznej. Wyznaczenie chiralności układu zdeterminowane jest przez system przypisania znaków "prim" ligandom z wymogiem takim, że symbol 1 górnej podstawy wielościanu umieszczony jest nad symbolem 1'' dolnej podstawy wielościanu. Sposób ten umożliwi wyrowadzenie pokazanej w przykładzie kolejności liczb pierwszeństwa oraz uzyskanie symbolu chiralności *C*. Na graniastosłup należy patrzeć z nad górnej podstawy. W tym przypadku otrzymanym deskryptorem stereochemicznych jest *TPR-6-1''11'-C*. Konwencja prostych skośnych (Podrozdział IR-9.3.4.11) może zostać również użyta i otrzymanym deskryptorem w przypadku jej zastosowanie jest  $\Delta$ .

Przykład:

11.



#### IR-9.4 Uwagi końcowe

Rozdział ten przedstawia sposoby otrzymywania nazw oraz opisywania związków koordynacyjnych. Procesy te wiążą się najpierw z wyróżnieniem atomów centralnych i ligandów (używając nazw, wzorów lub odpowiednich nazw skróconych, w zależności od potrzeb), oraz następnie z określeniem sposobu koordynowania ligandów do atomów centralnych. Ten ostatni etap wymaga wyróżnienia danych atomów centralnych (jeżeli może wystąpić jakaś niejednoznaczność) oraz opisanie występujących między ligandami przestrzennych zależności. Przestrzenne zależności między ligandami opisuje się za pomocą wielościanów koordynacyjnych (podając symbol wielościanu) oraz pierwszeństwa CIP atomów donorowych (podając wskaźnik konfiguracyjny oraz wyznaczając konfigurację absolutną).

## IR-9.5 Odnośniki literaturowe

1. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, eds. . W.H. Powell and H. Favre, Royal Society of Chemistry, w przygotowaniu.
2. W pozycji *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990, z powodu zachowania zgodności językowej, używany jest raczej termin "didentate" "bidentate". Powrót do zaakceptowanego wcześniej terminu "bidentate" odzwierciedla powszechność jego użycia.
3. Nazwy innych izotopów wodoru omawiane są w Podrozdziale IR-3.3.2
4. Nazwy ligandów organicznych powinny być tworzone zgodnie z zaleceniami IUPAC, zob. poz. 1.
5. W celu uproszczenia reguł oraz wyeliminowania możliwości pojawienia się niejednoznaczności kiedy nie jest wiadomo czy dany ligand posiada ładunek czy nie, ładunek liganda nie jest brany pod uwagę we wzorach związków koordynacyjnych. (W pozycji *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990, anionowe ligandy wyszczególniano przed ligandami elektrycznie obojętnymi)
6. Rozdział II-7 pozycji *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001.
7. *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001.
8. J.B. Casey, W.J. Evans and W.H. Powell, *Inorg. Chem.*, 20, 1333–1341 (1981).
9. A. von Zelewski, *Stereochemistry of Coordination Compounds*, John Wiley & Sons, Chichester, 1996.
10. A.M. Sargeson and G.H. Searle, *Inorg. Chem.*, 4, 45–52 (1965); P.J. Garnett, D.W. Watts and J.I. Legg, *Inorg. Chem.*, 8, 2534 (1969); P.F. Coleman, J.I. Legg and J. Steele, *Inorg. Chem.*, 9, 937–944 (1970).
11. B. Bosnich, C.K. Poon and M.L. Tobe, *Inorg. Chem.*, 4, 1102–1108 (1965); P.O. Whimp, M.F. Bailey and N.F. Curtis, *J. Chem. Soc.*, 1956–1963 (1970).
12. R.M. Hartshorn and D.A. House, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2577–2588 (1998).
13. R.S. Cahn, C. Ingold and V. Prelog, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 5, 385–415 (1966); V. Prelog and G. Helmchen, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 21, 567–583 (1982).
14. M.F. Brown, B.R. Cook and T.E. Sloan, *Inorg. Chem.*, 7, 1563–1568 (1978).
15. M. Brorson, T. Damhus and C.E. Schaeffer, *Inorg. Chem.*, 22, 1569–1573 (1983).

## **IR-10 Związki metaloorganiczne**

### **Spis treści**

#### **IR-10.1 Wstęp**

#### **IR-10.2 Nazwy metaloorganicznych związków metali przejściowych**

##### **IR-10.2.1 Pojęcia i definicje**

###### **IR-10.2.1.1 Liczba koordynacyjna (zam. Tomasz S. Poprawiono wszędzie)**

###### **IR-10.2.1.2 Chelatacja**

###### **IR-10.2.1.3 Określenie atomów donorowych i rodzaju koordynacji**

###### **IR-10.2.1.4 Stopień utlenienia i ładunek**

##### **IR-10.2.2 Związki z jednym pojedynczym wiązaniem metal-węgiel**

##### **IR-10.2.3 Związki metaloorganiczne z ligandem tworzącym kilka pojedynczych wiązań metal-węgiel**

###### **IR-10.2.3.1 Konwencja mi ( $\mu$ )**

###### **IR-10.2.3.2 Ligandy chelatujące**

###### **IR-10.2.3.3 Konwencja kappa**

###### **IR-10.2.3.4 Ligandy mostkowe**

###### **IR-10.2.3.5 Wiązanie metal-metal**

##### **IR-10. 2.4 Związki z wielokrotnymi wiązaniami metal-węgiel**

##### **IR-10.2.5 Kompleksy zawierające nienasycone cząsteczki lub grupy**

###### **IR-10.2.5.1 Konwencja eta ( $\eta$ )**

##### **IR-10.2.6 Nazewnictwo metalocenów**

#### **IR-10.3 Nomenklatura związków metaloorganicznych pierwiastków grup głównych**

##### **IR-10.3.1 Wprowadzenie**

##### **IR-10.3.2 Związki metaloorganiczne pierwiastków grupy 1 i 2**

##### **IR-10.3.3 Związki metaloorganiczne pierwiastków grup 13-16**

#### **IR-10.4 Kolejność atomów centralnych w wielocentrowych związkach metaloorganicznych**

##### **IR-10.4.1 Atomy centralne należące do grup 1-12**

##### **IR-10.4.2 Atomy centralne należące do grup 1-12 oraz 13-16 występujące w jednej cząsteczce związku**

##### **IR-10.4.3 Pierwiastki grup 13-16 jako atomy centralne**

#### **IR-10.5 Bibliografia**

#### **IR-10.1 Wstęp**

Obserwowany w ostatnich pięćdziesięciu latach ogromny wzrost zainteresowania chemią metaloorganiczną i odkrycie nowych typów związków chemicznych, w których występują nowe rodzaje wiązań chemicznych skutkuje potrzebą opracowania nowych zasad nazewnictwa związków metaloorganicznych. Rozdział ten stanowi znaczne poszerzenie zasad nomenklatury przedstawionych w sekcji I-10.9 zasad nomenklatury związków nieorganicznych opublikowanych w 1990 roku<sup>1</sup> i został oparty w głównej mierze na zaleceniach IUPAC z roku 1999 dotyczących nazewnictwa związków metaloorganicznych metali przejściowych.<sup>2</sup>

Zgodnie z definicją związek metaloorganiczny jest to dowolny związek chemiczny zawierający w cząsteczce przynajmniej jedno wiązanie pomiędzy atomem metalu i atomem

węgla. W związku z tym nazewnictwo tego rodzaju związków chemicznych musi odpowiadać jednocześnie zasadom obowiązującym dla związków organicznych jak i chemii koordynacyjnej (nawet jeżeli zasady nazewnictwa obowiązujące w obydwu tych grupach rozwijane są niezależnie od siebie).

Główna część tego rozdziału obejmuje nazewnictwo związków metaloorganicznych metali przejściowych oparte na nomenklaturze addytywnej omówionej w rozdziale IR-7 i zastosowanej do związków koordynacyjnych (rozdział IR-9) dodatkowo poszerzonej w takim stopniu jak to jest możliwe o zasady nazewnictwa ligandów organicznych. Najistotniejszym elementem przedstawionych zasad nomenklaturowych jest jednoznaczne określenie specyficznego rodzaju wiązania występującego w związkach metaloorganicznych.

W drugiej części rozdziału skrótowo przedstawiono zagadnienia związane z nazewnictwem związków metaloorganicznych pierwiastków grup głównych; zastosowano tutaj system podstawnikowy (wprowadzony w rozdziale IR-6) oparty o nazewnictwo wodoroków pierwiastków grup 13-16. Nazewnictwo związków metaloorganicznych pierwiastków grup 1 i 2 utworzono na podstawie nomenklatury addytywnej.

Należy podkreślić, że nomenklatura przedstawiona w tym rozdziale ogranicza się do dokładnego opisu budowy, czyli składu i rodzaju wiązań występujących w cząsteczce (jonie) związku; często równie istotne jest określenie relacji przestrzennych pomiędzy elementami strukturalnymi cząsteczki (jonu) związku (rozdział IR-9.2).

Należy mieć na uwadze, że w przypadku związków metaloorganicznych nazewnictwo nie obejmuje szczegółowych informacji o polarności wiązań, reaktywności i metodach syntezy

## **IR-10.2 Nazwy metaloorganicznych związków metali przejściowych**

### **IR-10.2.1 Pojęcia i definicje**

Zasady nazewnictwa związków koordynacyjnych, definicje i prawa przedstawione w rozdziałach IR-9.1 i IR-9.2 stanowią podstawę omówionego w tym rozdziale systemu nazewnictwa związków metaloorganicznych pierwiastków przejściowych. Ogólne zasady obowiązujące w nomenklaturze związków koordynacyjnych mogą być stosowane w nazewnictwie związków metaloorganicznych jednak wymagają one rozszerzenia o reguły dotyczące specyficznych typów wiązań występujących przy oddziaływaniu metalu z organicznymi ligandami typu nienasycone węglowodory (alkeny, alkiny) czy związki aromatyczne. W tym rozdziale pojęcia i reguły chemii koordynacyjnej zastosowano do zagadnień nazewnictwa związków metaloorganicznych i wskazano na potrzebę ich rozszerzenia w celu jednoznacznego opisu specyficznych typów wiązań występujących w tych związkach chemicznych.

#### **IR-10.2.1.1 Liczba koordynacyjna**

Definicja liczby koordynacyjnej zdefiniowana jako liczba wiązań  $\sigma$  pomiędzy ligandami a atomem centralnym (Rozdział IR-9.12.6) jest stosowana również do takich ligandów jak  $\text{CN}^-$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$  czy  $\text{PPh}_3$  gdzie wiązanie pomiędzy donorowym atomem i metalem obejmuje kombinacje oddziaływań typu  $\sigma$  i  $\pi$ . Udział wiązania typu  $\pi$  nie jest brany pod uwagę przy określaniu liczby koordynacyjnej, a w związku z tym atomy centralne związków koordynacyjnych  $[\text{Ir}(\text{CO})\text{Cl}(\text{PPh}_3)_2]$ ,  $[\text{RhI}_2(\text{Me})(\text{PPh}_3)_2]$  i  $[\text{W}(\text{CO})_6]$  mają odpowiednio liczby koordynacyjne równe 4, 5 i 6.

Jednak taka definicja liczby koordynacyjnej nie może być zastosowana do znacznej liczby związków metaloorganicznych, w których dwa lub więcej sąsiednich atomów w cząsteczce liganda oddziałuje z atomem centralnym bardzo często poprzez wiązania typu  $\sigma$ ,  $\pi$

i  $\delta$  (symbole  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$  odnoszą się do symetrii orbitali tworzących wiązanie pomiędzy ligandem a atomem centralnym).

Przykładowo ligand taki jak eten złożony z dwóch atomów węgla jest donorem jednej pary elektronowej. Eten koordynując poprzez obydwa atomy węgla może być donorem jednej lub dwu par elektronowych w zależności od typu koordynacji. Przy czym obydwa ligandy, eten i etyn, są ligandami monodentnymi. Natomiast wprowadzenie do sfery koordynacyjnej (dalej tak samo, przyp. Tomasz S) etenu lub etynu zmienia stopień utlenienia atomu centralnego i pod tym względem ligandy te są traktowane jako bidentnie chelatujące, będące, jak wynika z konfiguracji elektronowej powstającego związku koordynacyjnego, donorami dwóch par elektronowych. Rozpatrzenie powstających związków metaloorganicznych jako metalocyklopropanowych i metalocyklopropenowych zamiast jednostek koordynacyjnych(?) z ligandem etenowym czy etynowym pozwala na uniknięcie niejednoznaczności przy określaniu dentatności (dentności?) tych ligandów.

### **IR-10.2.1.2 Chelatacja**

Pojęcie chelatacji (IR-9.1.2.7) może być bezpośrednio zastosowane tylko do tych związków metaloorganicznych, w których atomy donorowe liganda są związane z atomem centralnym jedynie poprzez pojedyncze wiązanie  $\sigma$ ; dwuznaczność może pojawić się w przypadku prostych ligandów jak eten. Butadien i benzen koordynując wykorzystują dwie lub trzy pary elektronowe i w związku z tym są ligandami bi- i tridentnymi. Jednak pod względem stereochemicznym obydwa te ligandy są traktowane jako monodentne.

### **IR-10.2.1.3 Określenie atomów donorowych i rodzaju koordynacji**

W przypadku ligandów zawierających kilka różnych atomów donorowych, zwłaszcza w sytuacji gdy koordynacja nie zachodzi z udziałem wszystkich możliwych donorów, atomy bezpośrednio zaangażowane w tworzenie wiązania metal-ligand wskazuje się za pomocą symbolu pierwiastka, pisanego kursywą, poprzedzonego grecką literą kappa,  $\kappa$  (rozdziały IR-9.2.4.1 oraz IR-9.2.4.2). W nazewnictwie związków metaloorganicznych donorowe (wiązące) atomy węgla są zazwyczaj określane poprzez nazwę liganda. Jednak konwencja kappa jest niezbędna do określania donorowych heteroatomów w cząsteczkach ligandów organicznych jak również przy określaniu atomu donorowego w przypadku mostkowych ligandów w wielocentrowych związkach metaloorganicznych. Użyteczność konwencji kappa wynika z jej całkowitej jednoznaczności przy określaniu atomu donorowego liganda podczas tworzenia wiązań z jednym lub więcej atomami metalu. Zastosowanie tej konwencji przy nazewnictwie związków metaloorganicznych jest szerzej przedyskutowane w Rozdziale IR-10.2.3.3.

Uzupełnieniem konwencji kappa jest zastosowanie symbolu nomenklaturowego hapto - konwencja eta ( $\eta$ ) - a potrzeba wprowadzenia tej symboliki wynika ze specyfiki wiązań pomiędzy atomami metalu a nienasyconymi węglowodorami gdzie wiązanie odbywa się poprzez elektrony  $\pi$ . Oczywiście jest, że notacja hapto jest używana tylko wtedy, gdy istnieje kilka sąsiadujących atomów zaangażowanych w wiązanie metal-ligand. Zazwyczaj ligand koordynujący do metalu z wykorzystaniem elektronów p jest zbudowany z atomów jednego pierwiastka, ale nie zawsze tak jest. Dodatkowo nie muszą to być atomy węgla. Definicja konwencji eta jest podana w Rozdziale IR-10.2.5.1. Jakkolwiek opis wiązania metal-ligand może zostać podany w sposób zupełny tylko w oparciu o konwencję kappa to jednak w nomenklaturze związków metaloorganicznych konwencja eta jest szeroko wykorzystywana. Związki koordynacyjne o skomplikowanych strukturach mogą wymagać zastosowania obydwu konwencji nomenklaturowych (rozdział IR-9.2.4.3).

Ligandy organiczne zdolne do koordynacji poprzez utworzenie więcej niż jednego wiązania z atomem metalu mogą być ligandami chelatującymi (wiązanie z jednym atomem metalu), mostkowymi (wiązanie z więcej niż jednym atomem metalu) lub też występować jednocześnie w obu formach czyli jako chelatory i ligandy mostkowe. Ligandy tworzące mostki wskazuje się grecką literą  $\mu$  (mi) umieszczoną przed nazwą liganda (Rozdział IR-9.2.5.2). Przykłady zastosowania tej konwencji są podane w Rozdziałach IR-10.2.3.1 i IR-10.2.3.4.

#### IR-10.2.1.4 Stopień utlenienia i ładunek

Zagadnienie stopnia utlenienia atomu centralnego (patrz Rozdziały IR-4.6.1, IR-5.4.2.2 i IR-9.1.2.8) często jest trudne do zastosowania w przypadku związków metaloorganicznych. Szczególne trudności koncepcje te napotykają w przypadkach gdy nie można jednoznacznie określić czy ligand koordynuje jako kwas czy zasada Lewisa czy też następuje utleniająca addycja prowadząca do utworzenia związku metaloorganicznego. W związku z tym dla celów nomenklaturowych istotny jest tylko ładunek jednostki koordynacyjnej (związku metaloorganicznego), a formalny stopień utlenienia atomu centralnego nie jest rozpatrywany. Czytelnika zainteresowanego zagadnieniem stopni utlenienia związków metaloorganicznych odsyłamy do standardowych podręczników chemii koordynacyjnej.

#### IR-10.2.2 Związki z jednym pojedynczym wiązaniem metal-węgiel

W nazewnictwie związków metaloorganicznych wykorzystuje się standardowe nazwy ligandów jeżeli koordynacja do atomu centralnego następuje poprzez inny niż węgiel atom donorowy (IR-9.2.2.3). W związku z tym ligand  $\text{MeCOO}^-$  nosi nazwę octano,  $\text{Me}_2\text{As}^-$  to dimetyloarsenido a  $\text{PPh}_3$  to trifenylfosfina.

W przypadku gdy ligand organiczny koordynuje poprzez jeden z atomów węgla jest traktowany jako anion utworzony przez usunięcie hydronu, a jego nazwę tworzy się przez dodanie końcówki „-ido” do nazwy związku macierzystego.

Przykłady:

1.  $\text{CH}_3^-$  metanido
2.  $\text{CH}_3\text{CH}_2^-$  etanido
3.  $(\text{CH}_2=\text{CHCH}_2)^-$  propan-2-en-1-ido
4.  $\text{C}_6\text{H}_5^-$  benzenido
5.  $(\text{C}_5\text{H}_5)^-$  cyklopentadienido

Nazwa cyklopentadienido dla anionu  $(\text{C}_5\text{H}_5)^-$  jest dopuszczalna jako skrócona forma właściwej nazwy cyklopenta-2-dien-1-ido.

W związku z przedstawionymi przykładami nazwa  $[\text{TiCl}_3\text{Me}]$  to trichloro(metanido)tytan {chloro nie chlorido zgodnie z nazwami alternatywnymi wprowadzonymi przez komisję PTChem} (od Tomasz S. w Red Book 2005 mamy chlorido)

Alternatywą dla nazw ligandów organicznych koordynujących poprzez jeden atom węgla jest traktowanie ich jako podstawników powstających przez usunięcie jednego atomu wodoru z wyjściowego związku organicznego. Takie podejście bywa arbitralne zwłaszcza w przypadku związków metaloorganicznych gdzie ligandy tego rodzaju traktuje się jako aniony przy określaniu stopnia utlenienia atomu centralnego pomimo, że wiązanie metal-ligand ma charakter kowalencyjny. Jednak takie podejście do nazewnictwa ma długą tradycję w chemii organicznej i metaloorganicznej.

Przy tworzeniu nazw grup podstawnikowych stosuje się dwie metody:

- a) Zastąpienie końcówką „-yl” końcówki „-an” w nazwie wyjściowego związku organicznego. Jeżeli wyjściowy związek ma budowę łańcuchową rozumie się, że atom z wolną walencyjnością (po usunięciu wodoru) jest atomem terminalnym. W każdym przypadku atom ten ma lokant „1”. Metoda ta ma zastosowanie przy tworzeniu nazw nasyconych niecyklicznych i jednopierścieniowych węglowodorowych podstawników oraz w przypadku jednordzeniowych wodorków krzemu, germanu, cyny i ołowiu.

Przykłady:

- |     |   |                |
|-----|---|----------------|
| 6.  | CH <sub>3</sub> -   | metyl          |
| 7.  | CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -                                 | etyl           |
| 8.  | C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> -                                  | cykloheksyl    |
| 9.  | CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> - | butyl          |
| 10. | CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(Me)H-           | 1-metylobutyl  |
| 11. | Me <sub>3</sub> Si-   | Trimetylosilyl |

W związku z tym [TiCl<sub>3</sub>Me] nosi nazwę trichloro(metylo)tytan (trichlorido? Tomasz S, dalej zamienione na chlorido – Tomasz .S. zgodnie IR-9)

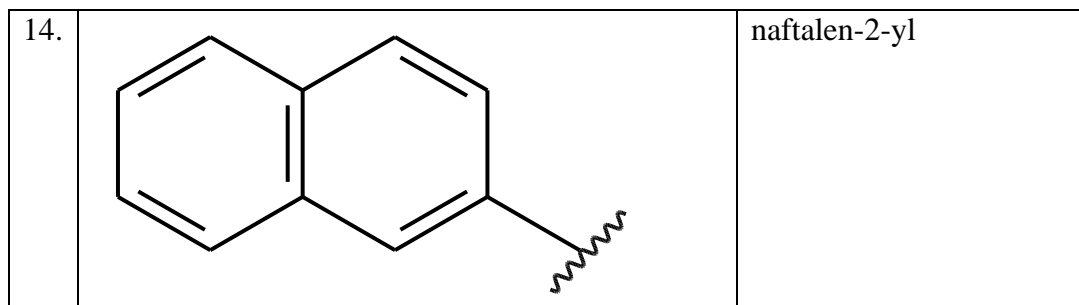
- b) Ogólna metoda polega na stosowaniu sufiksu „-yl” przy czym atom mający wolną walencyjność ma najniższy numer porządkowy. Numer lokanta musi być zawsze podawany w nazwie podstawnikowej zgodnie z zasadami nazewnictwa podstawnikowego.<sup>3</sup>

Przykłady:

- |     |   |                  |
|-----|---|------------------|
| 12. | CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C(Me)H- | pentan-2-yl      |
| 13. | CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -                    | propan-2-en-1-yl |

W przypadku węglowodorów wielopierścieniowych i związków heterocyklicznych stosuje się odpowiednią numerację atomów.<sup>3</sup>

Przykłady:



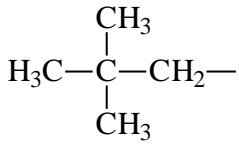
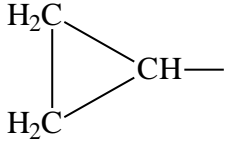
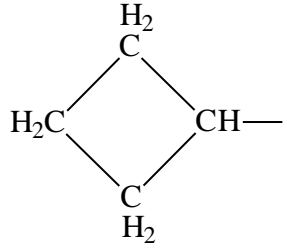
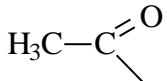
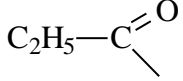
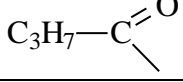
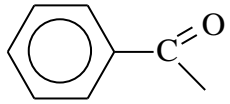
15.		1H-inden-1-yl
16.		morfolina-2-yl

W tabeli IR-10.1 zebrano przykładowe nazwy ligandów i ich anionów tworzących pojedyncze wiązanie z atomem metalu. Poniżej znajdują się przykłady związków metaloorganicznych, w których występuje pojedyncze wiązanie metal-węgiel.

**Tabela IR-10.1.** *Nazwy ligandów tworzących pojedyncze wiązanie metal-węgiel*

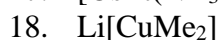
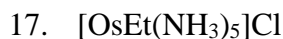
Wzór grupy	Nazwa systematyczna anionu	Nazwa systematyczna formy obojętnej	Nazwa alternatywna
CH <sub>3</sub> -	metanido	metyl	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	etanido	etyl	
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	propan-1-ido	propyl	
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH-	propan-2-ido	propan-2-yl lub 1-metyloetyl	izopropyl
CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> -	propan-2-en-1-ido	propan-2-en-1-yl	allil
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{C}- \\   \\ \text{H} \end{array}$	butan-2-ido	butan-2-yl lub 1-metylopropyl	<i>sec</i> -butyl
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \diagdown \\ \text{CH}-\text{CH}_2- \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C} \end{array}$	2-metylopropan-1-ido	2-metylopropyl	izobutyl
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}- \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	2-metylopropan-2-ido	2-metylopropan-2-yl lub 1,1-dimetyloetyl	<i>tert</i> -butyl



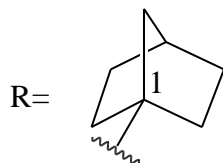
	2,2-dimetylopropan-1-ido	2,2-dimetylopropyl	
	cyklopropanido	cyklopropyl	
	cyklobutanido	cyklobutyl	
$C_5H_5^-$	cyklopentan-2,4-dien-1-ido	cyklopentan-2,4-dien-1-yl	cyklopentadienyl
$C_6H_5^-$	benzenido	fenyl	
$C_6H_5CH_2^-$	fenylmetanido	fenylmetyl	benzyl
	1-oksoetan-1-ido	etanoyl <sup>a</sup>	acetyl <sup>a</sup>
	1-oksopropan-1-ido	propanoyl <sup>a</sup>	propionyl <sup>a</sup>
	1-oksobutan-1-ido	butanoyl <sup>a</sup>	butyryl <sup>a</sup>
	okso(fenyl)metanido	benzenokarbonyl <sup>a</sup>	benzoyl <sup>a</sup>
$H_2C=CH-$	etenido	etenyl	winył
$HC\equiv C-$	etynydo	etynył	
$H_3Si-$	silanido	silył	
$H_3Ge-$	germanido	germył	
$H_3Sn-$	stannanido	stannył	
$H_3Pb-$	plumbanido	plumbył	

<sup>a</sup> nazwy preferowane

Przykłady:



19.

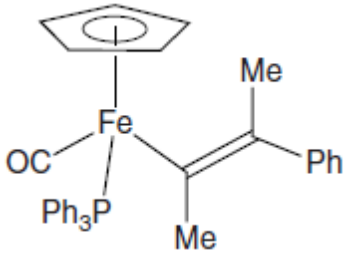
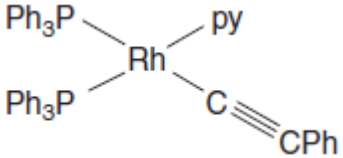
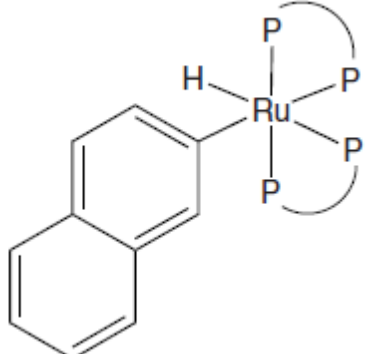



chlorek pentaamina(etyl)osmu(1+)

dimetylomiedzian(1-) litu

tetrakis(bicyklo[2.2.1]heptan-1-yl)chrom

acetyl(metyl)bis(trietylofosfina)platyna

21.  karbonyl( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)(*E*)-3-fenylbutan-2-en-2-yl(trifenylfosfina)żelazo
22.  (fenyletynyl)(pirydyna)bis(trifenylfosfina)rod
23.  bis[etano-1,2-diylobis(dimetylofosfina- $\kappa P$ )hydrido(naftalen-2-yl)ruten
-  = Me<sub>2</sub>PCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>PMe<sub>2</sub> = etano-1,2-diylobis(dimetylofosfina)

### IR-10.2.3 Związki metaloorganiczne z ligandem tworzącym kilka pojedynczych wiązań metal-węgiel

W przypadku gdy ligand organiczny koordynuje do atomu metalu (jednego lub więcej) tworząc pojedyncze wiązania metal-węgiel, nazwę liganda można utworzyć wychodząc z nazwy odpowiedniego węglowodoru przez usunięcie z jego cząsteczki odpowiedniej ilości atomów wodoru. Stosuje się w takim wypadku końcówki „diyl”, „triyl” odpowiednio do ilości utworzonych wiązań, a tym samym usuniętych z cząsteczki węglowodoru atomów wodoru. Lokant „1” wprowadza w taki sposób aby ponumerować najdłuższy łańcuch węglowy zgodnie z zasadą przypisania najniższych numerów łańcuchom bocznym lub podstawnikom w łańcuchu głównym. Numery lokantów muszą być podawane w nazwie liganda przy czym zasada ta z oczywistych względów nie dotyczy metanu.

W przypadku gdy ligandy te koordynują w formie anionów stosuje się końcówki „diido” i „triido”. Te same zasady nomenklaturowe są stosowane w przypadku układów hiperwalencyjnych jak na przykład dla mostkowych grup metylowych. Typowe ligandy tworzące dwa lub trzy pojedyncze wiązania metal-węgiel zostały przedstawione w Tabeli IR-10.2.

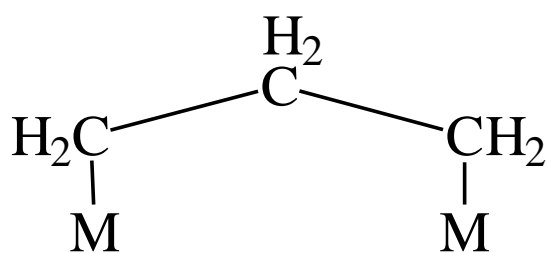
**Tabela IR-10.2.** Nazwy ligandów tworzących dwa lub więcej wiązań metal-węgiel

Wzór grupy	Nazwa systematyczna anionu	Nazwa systematyczna formy obojętnej	Nazwa alternatywna
-CH <sub>2</sub> -	metandiido	metandiyl	metylen
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	etan-1,2-diido	etan-1,2-diyl	etylen
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	propan-1,2-diido	propan-1,3-diyl	
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	butan-1,2-diido	butan-1,4-diyl	

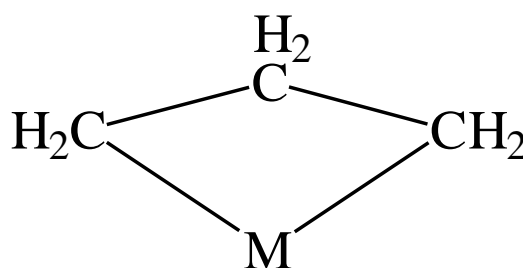
$\begin{array}{c}   \\ \text{HC} - \\   \end{array}$	metantriido	metanotriyl	
$\text{CH}_3\text{CH} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array}$	etan-1,1-diido	etan-1,1-diyl	
$\begin{array}{c}   \\ \text{CH}_3\text{C} - \\   \end{array}$	etan-1,1,1-triido	etan-1,1,1-triyl	
$-\text{CH}=\text{CH}-$	eten-1,2-diido	eten-1,2-diyl	
$\text{H}_2\text{C}=\text{C} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array}$	eten-1,1-diido	eten-1,1-diyl	
$-\text{C}\equiv\text{C}-$	etin-1,2-diido	etin-1,2-diyl	
$-\text{C}_6\text{H}_4-$	benzendiido (1,2-diido; 1,3-; itd)	benzendiyl (1,2-diido; 1,3-; itd)	fenylen (1,2-diido; 1,3-; itd)

### IR-10.2.3.1 Konwencja $\mu$

Organiczne ligandy tworzące więcej niż jedno wiązanie metal-węgiel mogą być ligandami chelatującymi gdy koordynują do jednego atomu metalu lub mostkowymi w przypadku koordynacji do dwóch lub większej ilości atomów centralnych. Mostkowy sposób koordynacji wskazuje grecka litera  $\mu$  (rozdziały IR-92.5.2 i IR-10.2.3.4).

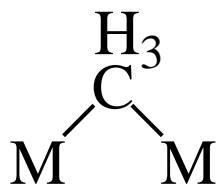


$\mu$ -propan-1,3-diyl  
(koordynacja mostkowa)

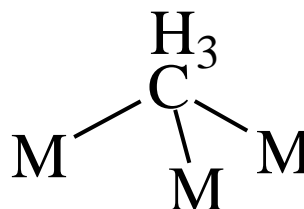


propan-1,3-diyl  
(chelate)

Liczbę atomów metalu koordynowaną na sposób mostkowy wskazuje dolny indeks umieszczony po prawej stronie symbolu  $\mu_n$ , gdzie  $n \geq 2$ . Oczywiście wartości 2 nie podaje się w oznaczeniu mostka.

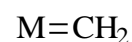
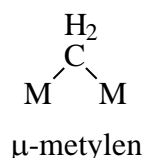


$\mu$ -metyl



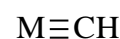
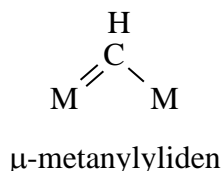
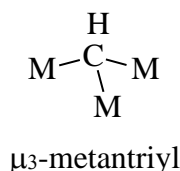
$\mu_3$ -metyl

Nazwa metylen może być stosowana jedynie w przypadku mostkowej koordynacji grupy  $\text{CH}_2$  ( $\mu$ -metylen). Natomiast gdy grupa  $\text{CH}_2$  tworzy jedno podwójne wiązanie metal-węgiel stosuje się nazwę metyliden.



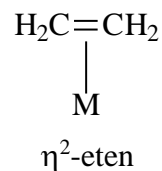
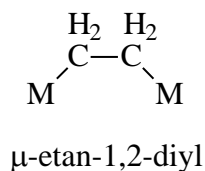
metylidyn

Analogiczna sytuacja ma miejsce w przypadku liganda HC, który może koordynować na trzy różne sposoby: jako mostek łączący trzy atomy metalu ( $\mu_3$ -metantriyl), dwa centra metaliczne ( $\mu$ -metanylyliden) oraz skoordynowany do jednego atomu centralnego (metylidyn).

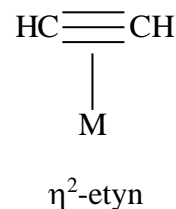
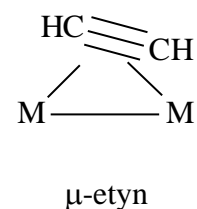
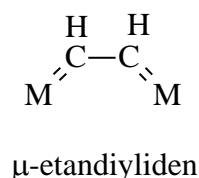
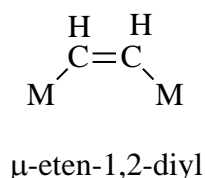


metylidyn

Mostkowy  $\text{CH}_2\text{CH}_2$  ligand nosi nazwę  $\mu$ -etan-1,2-diyl, a w przypadku koordynacji do jednego centrum metalicznego  $\eta^2$ -eten (IR-10.2.5).



Podobna sytuacja ma miejsce w przypadku CHCH; przy mostkowej koordynacji do dwóch atomów metalu nosi on nazwę  $\mu$ -eten-1,2-diyl lub gdy wiązania metal-węgiel są podwójne  $\mu$ -etandylyden (IR-10.2.4). Natomiast gdy obydwa atomy węgla koordynują do jednocześnie do obydwu atomów metalu nosi on nazwę  $\mu$ -etyn, a w przypadku koordynacji do jednego centrum metalicznego  $\eta^2$ -etyn.

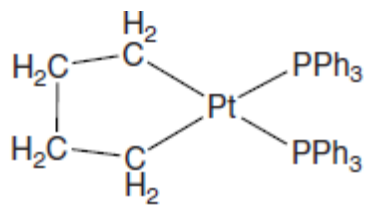


### IR-10.2.3.2 Ligandy chelatujące

Nazwy ligandów koordynujących w formie chelatowej tworzy na podstawie nazw związków wyjściowych, z których usuwa się dwa lub więcej atomów wodoru (IR-10.2.3) jak to zostało przedstawione na poniższych przykładach.

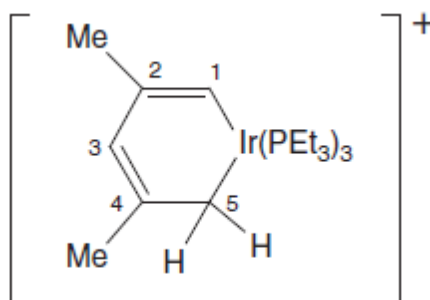
Przykłady:

1.



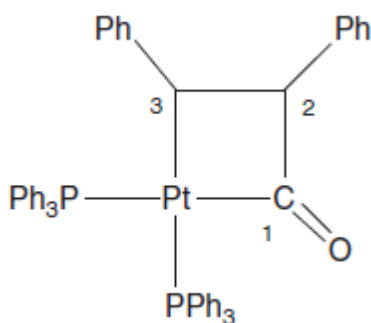
(butan-1,4-diyl)bis(trifenylfosfina)platyna

2.



(2,4-dimetylopentan-1,3-dien-1,5-diyl)tris(trifenylfosfina)iryd(1+)

3.



(1-okso-2,3-difenylopropan-1,3-diyl)bis(trifenylfosfina)platina

### IR-10.2.3.3 Konwencja kappa

Nazewnictwo ligandów tworzących pierścienie chelatowe poprzez donorowe heteroatomy wykorzystuje konwencję kappa (IR-9.2.4.2), w której atomy ligandów polidentycznych koordynujące do centrum metalicznego są wskazywane przez grecką literę kappa ( $\kappa$ ) poprzedzającą symbol koordynującego atomu zapisany kursywą. Górny indeks po prawej stronie symbolu kappa wskazuje liczbę wiązań tworzonych przez dany atom. Jeżeli w cząsteczce liganda występują nierównowagowe atomy (atomy tego samego rodzaju tworzące różną liczbę wiązań z atomem centralnym) to każdy z nich musi być oznaczony odrębnym symbolem  $\kappa$  z odpowiednim indeksem.

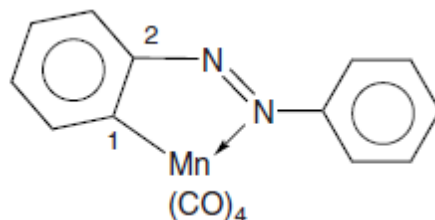
W prostych przypadkach jeden lub więcej indeksów górnych, można wykorzystać do rozróżnienia między atomami donorowymi tego samego rodzaju. W przeciwnym razie prawy górny indeks odpowiadający konwencjonalnej numeracji atomów w ligandzie jest używany do jednoznacznego zdefiniowania donorowego atomu. Symbole umieszcza się po części nazwy liganda, która reprezentuje określoną jego funkcjonalność czyli nazwie grupy funkcyjnej, pierścienia lub łańcucha, w którym znajduje się atom donorowy.

Często gdy jest to niezbędne poza heteroatomem określonym przy użyciu konwencji  $\kappa$ , podaje się w tej samej notacji określenie atomu węgla tworzącego wiązanie z metalem. Poniżej

na Przykładzie 1 podano w nazwie związku  $\kappa C^1$  choć nie jest to konieczne gdyż w jednoznaczny sposób określa położenie tego atomu węgla nazwa „fenyl”.

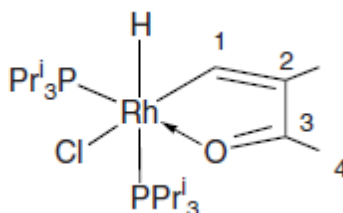
Przykłady:

1.



tetrakarbonyl[2-(2-fenyldiazen-1-yl- $\kappa N^2$ )fenyl- $\kappa C^1$ ]mangan

2.



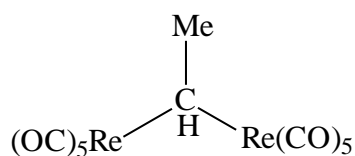
chloridohydrido(2-metylo-3-okso- $\kappa O$ -butan-1-en-1-yl)bis(triizopropylofosfina)rod

#### IR-10.2.3.4 Ligandy mostkowe

Ligand mostkowy jest oznaczany grecką literą  $\mu$  występującą przed nazwą liganda (IR-92.5.2 i IR-10.2.3.1). Ligandy mostkujące podaje się z zachowaniem kolejności alfabetycznej. Gdy w cząsteczce występują dwa takie same ligandy, z których jeden tworzy mostek to jego nazwa jest wymieniana w pierwszej kolejności. Gdy mostki tworzone są przez więcej niż jeden typ liganda wtedy w nazwie podawane są w kolejności zmniejszającej się krotności mostków; czyli w nazwie związku jako pierwszy pojawia się mostek  $\mu_3$ , a następnie  $\mu_2$ .

Przykład:

1.



( $\mu$ -etan-1,1-diyl)bis(pentakarbonylren)

W dijądrowych hetereometalicznych związkach metaloorganicznych kolejność atomów centralnych w nazwie określa kolejność pierwiastków i jest ona zgodna z listą pierwiastków zamieszczonych w Tabeli VI.<sup>2</sup>

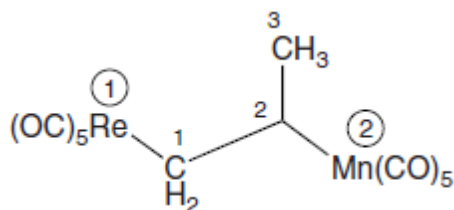
Numeracja atomów centralnych jest stosowana łącznie z konwencją  $\kappa$  wskazującą na donorowe atomy ligandów. Lokant atomu centralnego jest umieszczany przed symbolem  $\kappa$ , który może zawierać górny indeks wskazujący liczbę równocennych wiązań z atomem metalu (IR-9.2.5.5). W związku z tym dekarbonyl-1 $\kappa^5 C$ ,2 $\kappa^5 C$  oznacza, że atomy węgla pięciu ligandów karbonylowych są skoordynowane do pierwszego atomu centralnego (1), oraz że kolejne pięć koordynuje do atomu drugiego (2). W nazwach ligandów mostkowych znacznik  $\kappa$

<sup>2</sup> Tabele są zamieszczone na końcu książki

wskazuje na wiązanie z więcej niż jednym atomem centralnym; oznaczenia te rozdziela się dwukropkiem:  $\mu$ -propan-1,2-diyl- $1\kappa^1C^1:2\kappa^2C^2$ .

Przykład:

2.



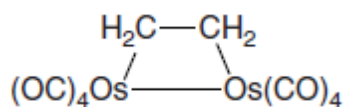
dekakarbonyl- $1\kappa^5C,2\kappa^5C$ -( $\mu$ -propan-1,2-diyl- $1\kappa^1C:2\kappa^2C$ )renmangan

### IR-10.2.3.5 Wiązanie metal-metal

Wiązanie metal-metal jest wskazywane w nazwie związku poprzez zapisane kursywą symbole odpowiednich pierwiastków połączone długą spacją i umieszczone w nawiasach zwykłych bezpośrednio za nazwami atomów, a przed określeniem ładunku. Symbole pierwiastków umieszcza się w takim samym porządku jak występują w nazwie związku to znaczy zgodnie z kolejnością określoną w tabeli VI. Liczbę wiązań metal-metal wskazuje cyfra arabska przed symbolem pierwszego pierwiastka oddzielona od niego spacją. Krotność wiązania metal-metal nie ma odniesienia w nomenklaturze.

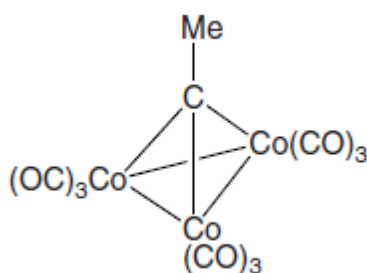
Przykłady:

1.



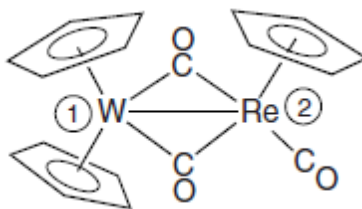
( $\mu$ -etan-1,2-diyl)bis(tetrakarbonylosm)(*Os-Os*)

2.



( $\mu_3$ -etan-1,1,1-triyl)-*triangulo*-tris(trikarbonylkobalt)(3 *Co-Co*)

3.



di- $\mu$ -karbonyl-karbonyl- $2\kappa^1C$ -bis( $1\eta^5$ -cyklopentadienyl)( $1\eta^5$ -cyklopentadienyl)wolframren(*W-Re*)

Stosowanie znacznika  $\eta$  jest wyjaśnione w paragrafie IR-10.2.5.1, a dodatkowe informacje na temat związków dwurdzeniowych i wielordzeniowych klastrów znajdują się w paragrafie IR-9.2.5.

#### IR-10. 2.4 Związki z wielokrotnymi wiązaniami metal-węgiel

Nazwy ligandów tworzących podwójne lub potrójne wiązania metal-węgiel mogą być tworzone zgodnie z terminologią podstawnikową na podstawie nazw odpowiednich wodorków, przez zastosowanie końcówek „yliden” dla wiązań podwójnych i „ylidyn” dla wiązań potrójnych. Stosowaniem końcówek rządzą dwie metody:

- a) Sufiks „yliden” lub „ylidyn” zastępuje końcówkę „an” w nazwie wyjściowego wodorku. Jeżeli wyjściowy związek ma budowę łańcuchową przyjmuje się, że atom od którego oderwano wodór jest atomem terminalnym i w związku z tym ma on lokant „1” pomijany w nazwie. Ta metoda wykorzystywana jest jedynie do nasyconych węglowodorów alifatycznych i jednopierścieniowych oraz w przypadku wodorków krzemu, germanu, cyny i ołowiu. Przyrostek „ylen” może być stosowany tylko w połączeniu z symbolem  $\mu$  dla określania mostkowych  $-\text{CH}_2-$  (metylen) lub  $-\text{C}_6\text{H}_4-$  (fenylen).
- b) Bardziej ogólna metoda polega na dodawaniu sufiksów „yliden” lub „ylidyn” do nazwy wyjściowego wodorku. Koordynujący atom uzyskuje najniższy możliwy numer zgodnie z numeracją atomów w związku wyjściowym. W przypadku ligandów tworzących wiązania podwójne z atomem metalu lokant atomu donorowego musi być podany w nazwie związku chyba, że jego położenie jest oczywiste.

Przykład:

1.  $\text{EtCH=}$  propyliden [metoda a)]  
 $\text{Me}_2\text{CH=}$  propan-2-yliden [metoda b)]

Oczywiście numeracja atomów i określanie najniższego lokanta dla donorowego atomu odbywa się na standardowych zasadach czyli należy określić najpierw najdłuższy łańcuch węglowy, a następnie najniższy możliwy lokant dla koordynującego atomu. W przypadku związków metalocyklicznych wybiera się taki kierunek numeracji aby podstawniki uzyskały najniższe lokanty. W sytuacji gdy tworzone są więcej niż jedno pojedyncze wiązanie metal-węgiel lub też wiązania wielokrotne sufiksy umieszcza się w kolejności: „yl”, „yliden” i na końcu „ylidyn” i wykorzystuje metodę b) do określenia możliwie najniższego lokanta dla donorowego atomu węgla. W przypadku gdy istnieje więcej niż jeden sposób numeracji najniższy lokant przypisuje się sufiksowi „yl” przed „yliden” a następnie numeruje się podstawniki i łańcuchy boczne.

Przykład:

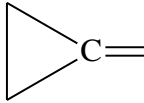
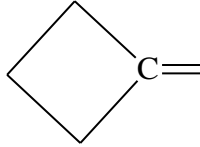
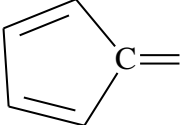
2.





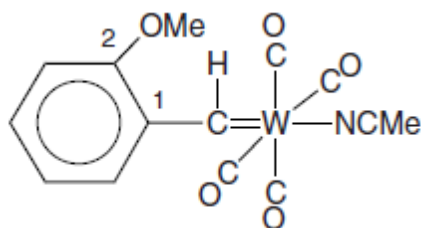
Nazwy typowych ligandów tworzący podwójne i potrójne wiązania metal-węgiel są przedstawione w Tabeli IR-10.3 oraz na przykładach znajdujących się w dalszej części tekstu. Symbol  $\eta$  występujący w przykładzie 5 jest wyjaśniony w rozdziale IR-10.2.5.1. Należy zaznaczyć, że nazwy anionów zebrane w Tabeli IR-10.2 mogą być również używane przy tworzeniu nazw tych ligandów jednak należy mieć na uwadze, że w takim wypadku nie jest możliwe określenie krotności wiązania metal-węgiel.

**Tabela 10.2.3** Nazwy ligandów tworzących wielokrotne wiązania metal-węgiel

Wzór grupy	Nazwa systematyczna	Nazwa alternatywna
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}$	metyliden	
$\text{MeCH}=\text{C}$	etyliden	
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{C}$	etenyliden	winyliden
$\text{H}_2\text{C}=\text{HC}-\text{HC}=\text{C}$	propan-2-en-1-yliden	alliliden
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{C}=\text{C}$	propan-1,2-dien-1-yliden	
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C} \end{array}$	propan-2-yliden	izopropyliden
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\   \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}=\text{C} \\   \quad   \\ \text{H}_3\text{C} \quad \text{H} \end{array}$	2,2-dimetylopropyliden	
	cyklopropyliden	
	cyklobutyliden	
	cyklopentan-2,4-dien-1-yliden	
$\text{PhHC}=\text{C}$	fenylometyliden	benzyliden
$\text{HC}=\text{C}$	metanylyliden	
$\text{HC}\equiv\text{C}$	metyliden	
$\text{MeC}\equiv\text{C}$	etyliden	
$\text{EtC}\equiv\text{C}$	propyliden	
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{C}\equiv\text{C} \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	2,2-dimetylopropyliden	
$\text{PhC}\equiv\text{C}$	fenylometyliden	benzyliden

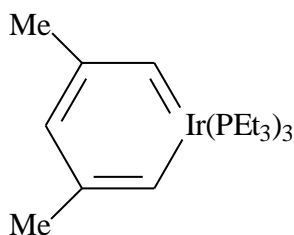
Przykłady:

3.



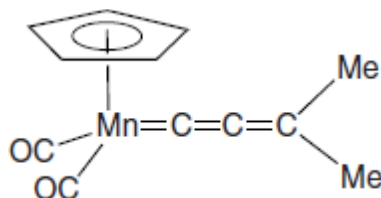
(acetonitryl)tetrakarbonyl[(2-metoksyfenylo)metyliden]wolfram

4.



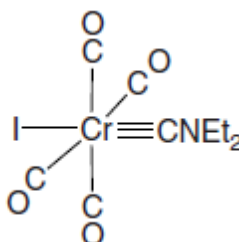
(2,4-dimetylopentan-1,3-dien-1-yl-5-yliden)tris(trietylofosfina)iryd

5.



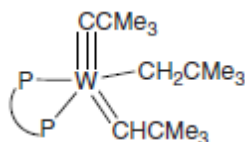
dikarbonyl( $\eta^5$ -cyklopentadienylo)(3-metylobutan-1,2-dien-1-yliden)mangan

6.

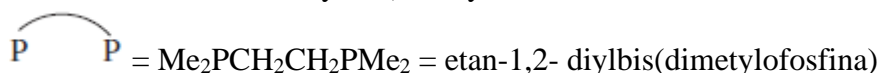


tetrakarbonyl[(dietyloamino)metyliden]jodochrom

7.



(2,2-dimetylopropyl)(2,2-dimetylopropyliden)(2,2-dimetylopropylidyn)[etan-1,2-diylobis(dimetylofosfina- $\kappa P$ )]wolfram



### IR-10.2.5 Kompleksy zawierające nienasycone cząsteczki lub grupy

Od czasu odkrycia soli Zeisa,  $\text{K}[\text{Pt}(\eta^2\text{-C}_2\text{H}_4)\text{Cl}_3]$  pierwszego kompleksu metaloorganicznego, a zwłaszcza od czasu opracowania syntezy ferrocenu,  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$

liczba różnorodnych związków metaloorganicznych z nienasyconymi ligandami gwałtownie wzrasta.

Kompleksy zawierające ligandy koordynujące do atomu centralnego poprzez elektrony  $\pi$  zlokalizowane pomiędzy dwoma atomami (koordynacja boczna) wymagają specyficznej nomenklatury. Ligandy te zazwyczaj należą do alkenów, alkinów i związków aromatycznych, ale również mogą to być związki nie zawierające węgla w cząsteczkach, w których wiązania wielokrotne występują pomiędzy heteroatomami. Kompleksy tego rodzaju noszą nazwę  $\pi$ -kompleksów, chociaż właściwa natura wiązań ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ) zazwyczaj nie jest dokładnie określona. Wiązanie pomiędzy atomami donorowymi a metalem w tego typu związkach najczęściej nie jest rozpatrywane na gruncie teoretycznym i w związku z tym stosowanie określeń typu  $\sigma$  czy  $\pi$  w nomenklaturze tych związków nie jest zalecane; choćby ze względu na fakt że te określenia odnoszą się do symetrii orbitali i rodzajów oddziaływań pomiędzy nimi.

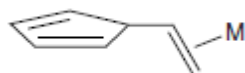
Ligandy takie jak alkeny, alkiny, nitryle i diazyny czy inne jak allyl ( $C_3H_5$ ), butadien ( $C_4H_6$ ), cyklopentadienyl ( $C_5H_5$ ), cykloheptatrienyl ( $C_7H_7$ ) i cyklooktatrien ( $C_8H_8$ ) z formalnego punktu widzenia mogą być rozpatrywane jako aniony, cząsteczki obojętne, a nawet w niektórych przypadkach jako kationy. Struktury tych związków jak również natura wiązań w nich występujących są często skomplikowane i trudne do określenia. Nomenklatura tych ligandów zazwyczaj opiera się na ich składzie stechiometrycznym i jest konstruowana w sposób zbliżony do omówionej w poniższych rozdziałach.

Nazwy ligandów określa się zgodnie ze standardowymi zasadami nomenklatury z uwzględnieniem specyfiki dotyczącej numeracji skondensowanych pierścieni węglowodorowych.<sup>3</sup>

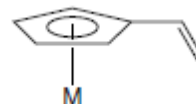
Nazwy ligandów rozpatrywanych w nomenklaturze podstawnikowej tworzy się od wyjściowych wodorków i uzyskują końcówki „yl”, „diyl”, „ylden” itd., w zależności od usuniętej ze związku wyjściowego ilości hydronów. Ligandy anionowe uzyskują końcówki „ido”, „diido” itd.

#### IR-10.2.5.1 Konwencja eta ( $\eta$ )

Specyfika wiązania nienasyconych węglowodorów do metalu poprzez elektrony  $\pi$  jest określana przez zastosowanie nomenklatury „hapto”, co prowadzi do jednoznacznego opisu wiązań w tych związkach metaloorganicznych.<sup>4</sup> Grecki symbol  $\eta$  (eta) przedstawia topologiczny opis wiązania pomiędzy metalem a ligandem. Liczbę atomów liganda koordynujących w ten sposób do metalu wskazuje górny indeks z prawej strony symbolu eta:  $\eta^3$  (eta trzy lub trihapto),  $\eta^4$  (eta cztery lub tetrahapto),  $\eta^5$  (eta pięć lub pentahapto), itd. Symbol  $\eta$  dodawany jest jako przedrostek do nazwy liganda lub do tej części nazwy liganda, która w jednoznaczny sposób określa wiązanie, jak na przykład: cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\eta^2$ -etan oraz winyl- $\eta^5$ -cyklopentadienyl:



cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\eta^2$ -etan

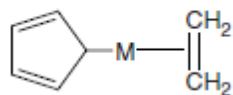


winyl- $\eta^5$ -cyklopentadienyl

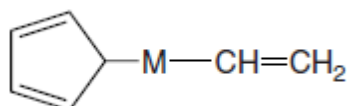
Nazwa  $\eta^5$ -cyklopentadienyl, choć niejednoznaczna, jest akceptowana jako skrót dla  $\eta^5$ -cyklopentan-2,4-dien-1-yl.

Nazwy ligandów są umieszczane w nawiasach przy konstruowaniu nazw kompleksów. Należy zwrócić uwagę na konieczność rygorystycznego przestrzegania form nomenklatury przy opisie sposobu koordynacji cyklopentadienu. Koordynacja tego liganda poprzez atom węgla wymaga zastosowania konwencji  $\kappa$  w nazewnictwie. Co zresztą

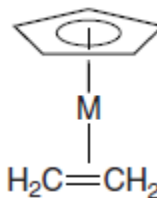
jest oczywiste w przypadku ligandów mogących koordynować na różne sposoby z atomem metalu. Na uwagę zasługuje przykład 17 w dalszej części tekstu gdzie ligand, którego nazwa posiada końcówkę „yl”, ale sposób koordynacji określony jest poprzez znacznik  $\eta$  w nazwie; w przykładzie 24 atom C1 z pierścienia cyklopentadienylowego tworzy wiązanie z obydwooma atomami metalu.



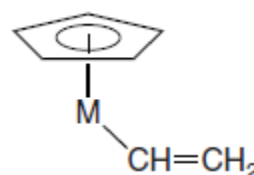
(cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\kappa C^1$ )( $\eta^2$ -eten)



(cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\kappa C^1$ )(winył)



( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)( $\eta^2$ -eten)



( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)(winył)

Nazewnictwo kompleksów z nienasyconymi ligandami zawierającymi heteroatomy jest tworzone zgodnie z tymi samymi regułami jeżeli obydwa atomy węgla oraz heteroatomy są skoordynowane do atomu centralnego. Nazwy typowych nienasyconych cząsteczek i grup występujących jako ligandy są przedstawione w Tabeli IR-10.4 i na przykładach w dalszej części tekstu. W przypadku stosowania prefiksu  $\eta$ , używa się skróconych form nazw anionów lub podstawników, na przykład:  $\eta^5$ -cykloheksadienido zamiast  $\eta^5$ -cykloheksan-2,4-dien-1-ido i  $\eta^5$ -cykloheksadienyl zamiast  $\eta^5$ -cykloheksan-2,4-dien-1-yl.

**Tabela IR-10.4** Nazwy nienasyconych cząsteczek i grup występujących jako ligandy

Wzór liganda <sup>a</sup>	Nazwa systematyczna anionu	Nazwa systematyczna liganda obojętnego	Nazwa alternatywna
	$\eta^3$ -propenido	$\eta^3$ -propenyl	$\eta^3$ -allil
	$\eta^3$ -(Z)-butenido	$\eta^3$ -(Z)-butenyl	
	$\eta^3$ -2-metylopropenido	$\eta^3$ -2-metylopropyl	$\eta^3$ -2-metyloallil
	$\eta^4$ -2-metylidenpropan-1,3-diido	$\eta^4$ -2-metylidenpropan-1,3-diyl	
	$\eta^3, \eta^3$ -2,3-dimetyloidenbutan-1,4-diido	$\eta^3, \eta^3$ -2,3-dimetyloidenbutan-1,4-diyl	$\eta^3, \eta^3$ -2,2'-biallil
	$\eta^5$ -(Z,Z)-pentandienido	$\eta^5$ -(Z,Z)-pentandienyl	

	$\eta^5$ -cyklopentadienido	$\eta^5$ -cyklopentadienyl	
	pentametylo- $\eta^5$ - cyklopentadienido	pentametylo- $\eta^5$ - cyklopentadienido	
	$\eta^6$ -cykloheksandienido	$\eta^6$ -cykloheksadienyl	
	$\eta^7$ -cykloheptatrienido	$\eta^7$ -cykloheptatrienyl <sup>b</sup>	
	$\eta^7$ -cyklooktantetrienido	$\eta^7$ -cyklooktatetrienyl <sup>c</sup>	
		1-metyl- $\eta^5$ -1 <i>H</i> -borol	
	$\eta^5$ -azacyklopentadienido	$\eta^5$ -azacyklopentadienyl	$\eta^5$ -1 <i>H</i> -pirolyl
	$\eta^5$ - fosfacyklopentadienido	$\eta^5$ - fosfacyklopentadienyl	$\eta^5$ -1 <i>H</i> -fosfolyl
	$\eta^5$ - arsacyklopentandienido	$\eta^5$ - arsacyklopentadienyl	$\eta^5$ -1 <i>H</i> -arsolyl
	$\eta^6$ -borinin-1-ido		$\eta^6$ -borinidobenzen <sup>d</sup>
	$\eta^6$ -1,4-diborinin-1,4- diido		$\eta^6$ -1,4- diboranidabenzene <sup>e</sup>

<sup>a</sup> – wzory są narysowane w sposób pokazujący ligandy w postaci takiej jaką mają po koordynacji do metalu (nie jako wolne ligandy organiczne)

<sup>b</sup> – nazwa  $\eta^7$ -tropyl nie jest prawidłowa

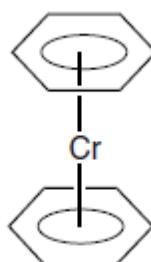
<sup>c</sup> – nazwa  $\eta^7$ -homotropyl nie jest prawidłowa

<sup>d</sup> – nazwa  $\eta^6$ -boratobenzen nie jest prawidłowa

<sup>e</sup> – nazwa  $\eta^6$ -diboratobenzen nie jest prawidłowa

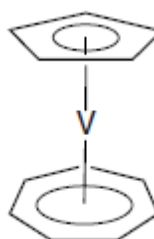
Przykłady:

1.



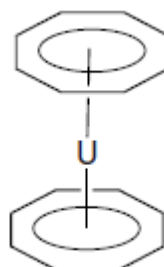
bis( $\eta^6$ -benzen)chrom

2.



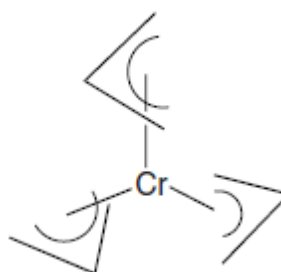
( $\eta^7$ -cykloheptatrienyl)( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)wanad

3.



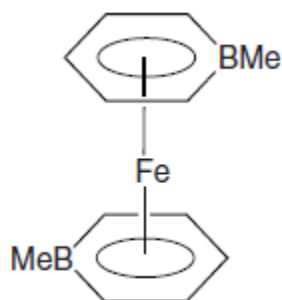
bis( $\eta^7$ -cyklooktatraen)uran (patrz IR-10.2.6)

4.



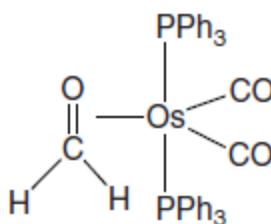
tris( $\eta^3$ -allil)chrom

5.



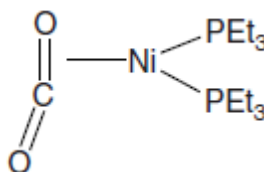
bis( $\eta^6$ -1-metyl-1-boranidobenzen)żelazo

6.



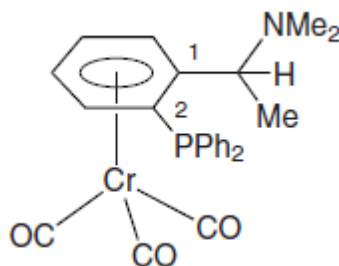
dikarbonyl( $\eta^2$ -formaldehyd)bis(trifenylfosfina)osm

7.



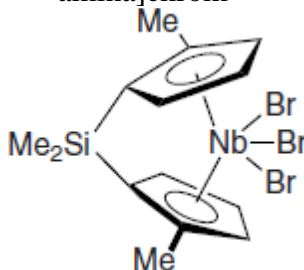
( $\eta^2$ -ditlenek węgla)bis(trietylofosfina)nikiel

8.



trikarbonyl(*N,N*-dimetylo-1-[2-(difenylfosfino)- $\eta^6$ -fenyl]etan-1-amina]chrom

9.



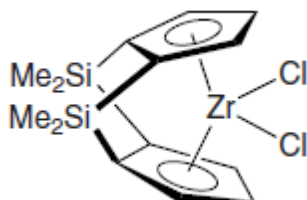
tribromido[1,1'-(dimetylosilandiyl)bis(2-metylo-  $\eta^5$ -cyklopentadienyl)]niob

W przypadku gdy wszystkie wiązania wielokrotne liganda są zaangażowane w tworzenie wiązań, gdy ligand może przyjmować różne formy przy tworzeniu wiązań z metalem

lub w przypadku gdy koordynacja następuje do kilku atomów w postaci mostka, lokanty atomów zaangażowanych w wiązania podaje się w kolejności numerycznej przed symbolem  $\eta$  poprzedzone łącznikiem. Koordynacja poprzez więcej niż dwa sąsiadujące atomy węgla powinna być podawana w nazwie w formie skróconej, czyli (1-4- $\eta$ ) zamiast (1,2,3,4- $\eta$ ). Lokanty i symbol  $\eta$  umieszcza się w nawiasach bez używania indeksów.

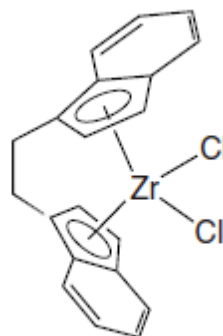
Przykłady:

10.



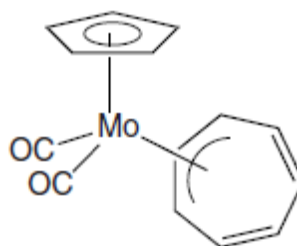
dichlorido[(1-3,3a,8a:4a,5-7,7a- $\eta$ )-4,4-8,8-tetrametylo-1,4,5,8-tetrahydro-4,8-disililo-*s*-inden-1,5-diyl]cyrkon

11.



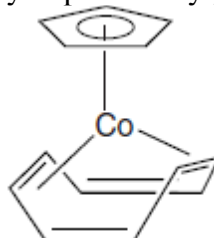
dichlorido[1,1'-(etan-1,2,-diyl)bis(1-3,3a,7a- $\eta$ -1*H*-inden-1-yl)]cyrkon

12.



dikarbonyl[(1-3- $\eta$ )cykloheptan-2,4,6-trien-1-yl]( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)molibden

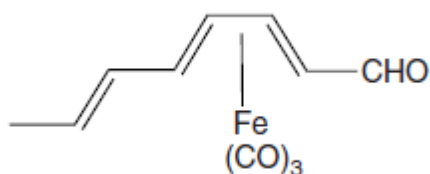
13.



[(1,2,5,6- $\eta$ )-cyklooktatraen]( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)kobalt

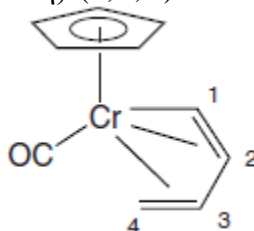


14.

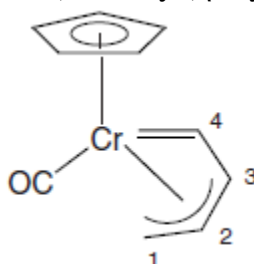


trikarbonyl(2-5-η)-(E,E,E)-oktatrienal)żelazo

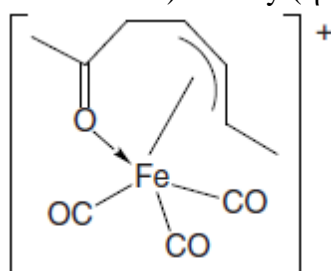
15.

(η<sup>4</sup>-butan-1,3-dien-1-yl-κC<sup>1</sup>)karbonyl(η<sup>5</sup>-cyklopentadienyl)chrom

16.

[(1-3-η)-butan-2-en-1-yl-4-iliden-κC<sup>4</sup>]karbonyl(η<sup>5</sup>-cyklopentadienyl)chrom

17.

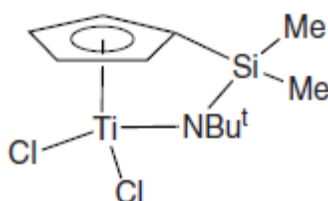


trikarbonyl[6-okso-κO-(2-4-η)-heptan-3-en-2-yl]żelazo(1+)

Zgodnie z wcześniejszymi przykładami symbol  $\eta$  może występować w połączeniu z notacją  $\kappa$  (IR-10.2.3.3). Symbol  $\eta$  poprzedza nazwę liganda, a  $\kappa$  może być umieszczony na końcu nazwy lub, w przypadku bardziej złożonych struktur w miejscu nazwy liganda określającej funkcje atomów koordynujących do atomu centralnego związku metaloorganicznego.

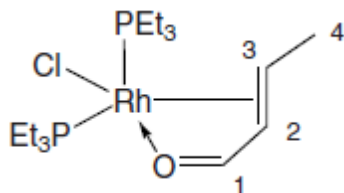
Przykłady:

18.



[*N*-*tert*-butylo( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)dimetylokrzemamido- $\kappa N$ ]dichloridotytan

19.

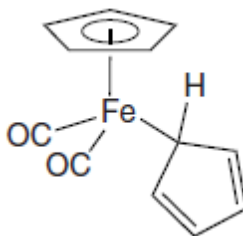


[(*E*)- $\eta^2$ -butan-2-enal- $\kappa O$ ]chloridobis(trietylofosfina)rod

Nie stosuje się symbolu  $\eta^1$ . Dla liganda cyklopentadienylowego związanego z metalem tylko jednym wiązaniem  $\sigma$  używa się nazw cyklopentan-2,4-dien-1-yl lub cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\kappa C^1$ .

Przykład:

20.

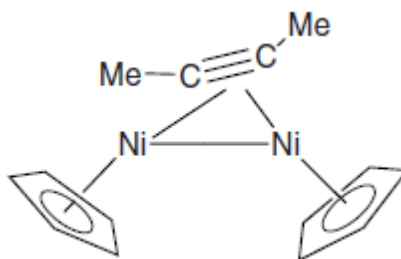


dikarbonyl( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)(cyklopentan-2,4-dien-1-yl- $\kappa C^1$ )żelazo

W przypadku gdy nienasycone węglowodory występują jako ligandy mostkowe używa się prefiksu  $\mu$  (IR-10.2.3.1, IR-10.2.3.4) w połączeniu, gdy jest to konieczne, z  $\kappa$  i  $\eta$ . Dodatkowo stosuje się dwukropek do rozdzielenia lokantów wskazujących koordynację liganda mostkowego do dwóch różnych atomów metalu w cząsteczce. Numeracja atomów jest zgodna z zasadami podanymi w rozdziale IR-9.2.5.6 i jest umieszczana przed symbolami  $\eta$  i  $\kappa$  bez stosowania łącznika. W przypadku konieczności numeracji ligandów lokant jest oddzielany łącznikiem od symbolu  $\eta$  a całość jest zamknięta w nawiasach, np. 1(2-4- $\eta$ ).

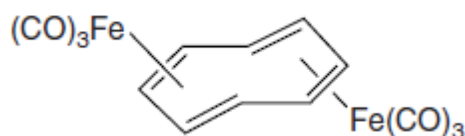
Przykłady:

21.



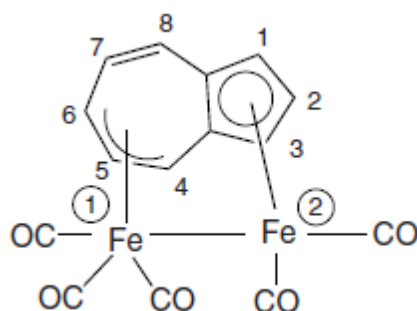
( $\mu$ - $\eta^2$ : $\eta^2$ -butan-2-yn)[bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)nikiel](*Ni-Ni*)

22.



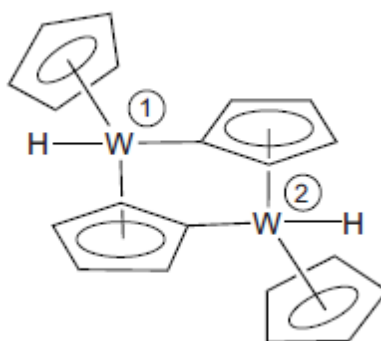
trans-[ $\mu$ -(1-4- $\eta$ :5-8- $\eta$ )-cyklooktatetraen]bis(trikarbonylżelazo)

23.



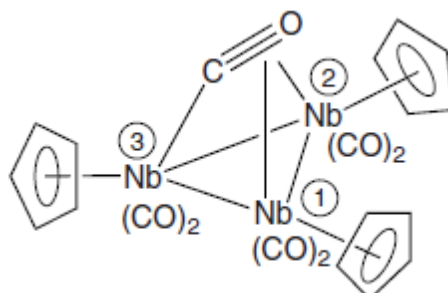
{ $\mu$ -[2(1-3,3a,8a- $\eta$ ):1(4-6- $\eta$ )]azulen}(pentakarbonyl-1 $\kappa^3$ C,2 $\kappa^3$ C)diżelazo(*Fe-Fe*)

24.



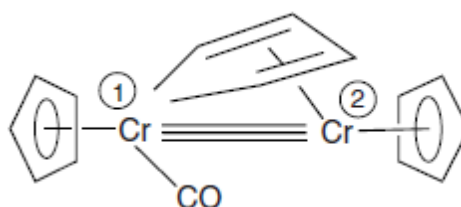
( $\mu$ -1 $\eta$ -cyklopentan-2,4-dien-1,1-diyl-2 $\kappa$ C)( $\mu$ -2 $\eta^5$ -cyklopentan-2,4-dien-1,1-diyl-1 $\kappa$ C)bis[( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)hydridowolfram]

25.



( $\mu_3$ -1 $\eta^2$ :2 $\eta^2$ -karbonyl-3 $\kappa$ C-*triangulo*-tris[dikarbonyl( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)niob](3 *Nb-Nb*)

26.

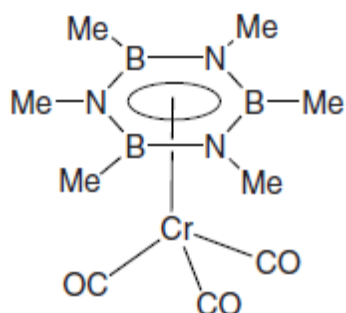


( $\mu$ -2 $\eta^4$ -butan-1,3-dien-1,4-diyl-1 $\kappa^2$ C<sup>1</sup>,C<sup>4</sup>)karbonyl-1 $\kappa$ C-bis[( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)chrom](*Cr-Cr*)

Konwencja eta może być stosowana również do takich ligandów jak cyklotriborazan czy cyklopentafosfan, koordynujące z metalami poprzez układ wiązań  $\pi$ .

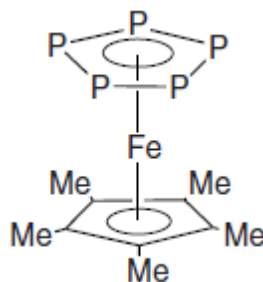
Przykłady:

27.



trikarbonyl( $\eta^6$ -heksametylo-1,3,5,2,4,6-cyklotriborazan)chrom  
lub trikarbonyl( $\eta^6$ -heksametyloborazyna)chrom

28.

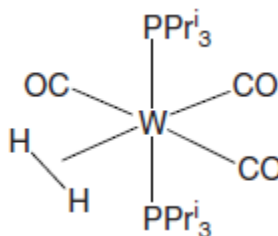


(pentametylo- $\eta^5$ -cyklopentadienyl)( $\eta^5$ -cyklopentafosfolyl)żelazo

Ta sama konwencja jest stosowana w przypadku ligandów tworzących wiązania  $\sigma$  przy koordynacji bocznej; na przykład cząsteczki wodoru ( $\eta^2$ -H<sub>2</sub>)<sup>5</sup> lub nasyconych węglowodorów tworzących wiązania agostyczne.<sup>6</sup> Symbol  $\eta$  oraz lokanty opisujące oddziaływanie agostyczne podaje się na końcu nazwy liganda. Na przykładzie 30 oddziaływanie agostyczne zaznaczono strzałką.

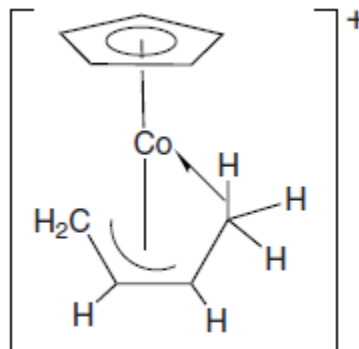
Przykłady:

29.



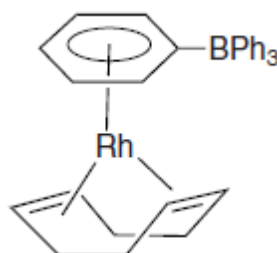
trikarbonyl( $\eta^2$ -diwodór)bis(triizopropylofosfina)wolfram

30.



$[(1-3-\eta)\text{-butan-2-en-1-yl-}\eta^2\text{-C}^4\text{,H}^4](\eta^5\text{-cyklopentadienyl})\text{kobalt}(1+)$

31.



$(\eta^2, \eta^2\text{-cyklooktan-1,5-dien})(\eta^6\text{-fenylotrifenylboran})\text{rod}$   
 nazwa alternatywna  $[1.2.5.6-\eta]\text{-cyklooktan-1,5-dien}](\eta^6\text{-fenylotrifenylboranido})\text{rod}$

### IR-10.2.6 Nazewnictwo metalocenów

Pierwszym otrzymanym związkiem kompleksowym zawierającym w swojej cząsteczce tylko pierścieniowy węglowodór jako ligand był bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)żelazo, który charakteryzuje się „kanapkowa” strukturą z dwoma równoległymi pierścieniami ( $\eta^5$ ) związanymi z atomem centralnym poprzez układ skondensowanych elektronów  $\pi$ . Odkrycie, że związek ten ulega elektrofilowej substytucji podobnie jak benzen doprowadziło do utworzenia zwyczajowej nazwy „ferrocen” i analogicznych nazw dla innych „metalocenów”.

Przykłady:

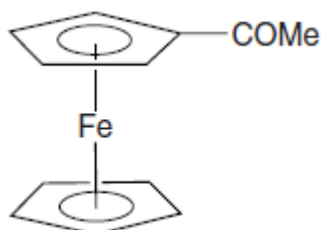
1.  $[\text{V}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  wanadocen
2.  $[\text{Cr}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  chromocen
3.  $[\text{Co}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  kobaltocen
4.  $[\text{Ni}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  niklocen
5.  $[\text{Ru}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  rutenocen
6.  $[\text{Os}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  osmocen

Nazewnictwo metalocenów może być tworzone poprzez stosowanie standardowych organicznych przyrostków (nomenklatura funkcjonalna) lub też za pomocą odpowiednich

przedrostków. W nomenklaturze podstawnikowej korzysta się z końcówek: „ocenyl”, „ocenodiył”, „ocenotriyl” itd.

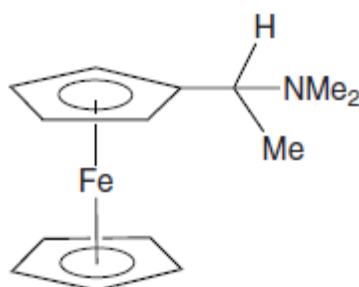
Przykłady:

7.



acetyloferrocen lub 1-ferrocenyloetan-1-on

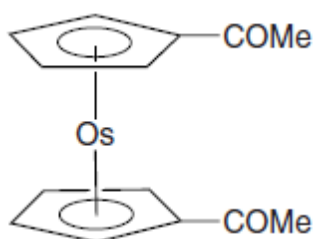
8.



1-[1-dimetyloamino)etyl]ferrocen lub 1-ferrocenyl-*N,N*-dimetyloetan-1-amina

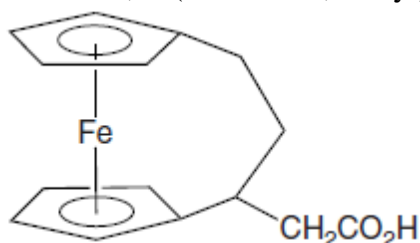
Podstawniki w równocennych pierścieniach cyklopentadienylowych metalocenów uzyskują najniższe możliwe lokanty; w ten sposób pierścienie numerowane są jako 1-5 a drugi odpowiednio 1'-5'.

9.



1,1'-diacetyloosmocen lub 1,1'-(osmocen-1,1'-diyl)bis(etan-1-on)

10.



1,1'-(4-karboksybutan-1,3-diyl)ferrocen lub kwas 3,5-(ferrocen-1,1'-diyl)pentanowy

11.  $[\text{Ru}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2]$   
dekametylorutenocen lub  
bis(pentametylo- $\eta^5$ -cyklopentadienyl)ruten

12.  $[\text{Cr}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{Et})_2]$   
1,1'-dietylooktametylochromocen lub  
bis(1-etylo-2,3,4,5-tetrametylo- $\eta^5$ -cyklopentadienyl)chrom
13.  $[\text{Co}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{PPh}_2)_2]$   
1,1'-bis(difenylofosfynyl)kobaltocen lub  
(kobaltocen-1,1'-diyl)bis(difenylofosfina)

Nomenklatura „metalocenowa” nie może być stosowana do wszystkich cyklopentadienylowych związków metali przejściowych. Przykładowo istnieją dwa izomery o wzorze sumarycznym  $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{Ti}$ , ale żaden z nich nie zawiera „kanapkowego” układu pierścieni charakterystycznego dla ferrocenu i w związku z tym nie może być nazywany tytanocenem. Podobnie „manganocen” jest niewłaściwą nazwą dla  $[\text{Mn}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$ , który w postaci stałej wykazuje strukturę łańcuchową bez możliwości wyodrębnienia pojedynczych układów „kanapkowych”. Natomiast dekametylomanganocen  $[\text{Mn}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2]$  jak również dekametylorenocen  $[\text{Re}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2]$  wykazują typowe ułożenie pierścieni. Generalnie wraz ze wzrostem wartości liczby atomowej metalu występowanie klasycznych układów ferrocenowych staje się coraz rzadsze.

W związku z tym stosowanie końcówki „ocen” jest ograniczone do pojedynczych cząsteczek o ogólnym wzorze bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)metal (i pochodnych cyklopentadienylu), w których pierścienie węglowodorowe są ułożone równolegle, a metal należy do pierwiastków bloku d (ta nomenklatura nie jest stosowana do związków pierwiastków bloków s i p takich jak  $\text{Ba}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$  czy  $\text{Sn}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ ).

Utlenione formy uzyskują nazwy soli typu metalocenu/owych( $n+$ ). W celu uniknięcia nieporozumień związanych ze stosowaniem końcówek odpowiednich dla nomenklatury podstawnikowej nazwa bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)żelazo(1+) jest preferowana w odróżnieniu od określenia ferrocenium(1+) dla  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]^+$ .

Przykłady:

14.  $[\text{Co}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2][\text{PF}_6]$   
heksafluoridofosforan bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)kobaltu(1+)
15.  $[\text{Co}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{COMe})][\text{BF}_4]$   
tetrafluoridoboran (acetylo- $\eta^5$ -cyklopentadienyl)( $\eta^5$ -  
cyklopentadienyl)kobaltu(1+)

Utleniona forma osmocenu w postaci stałej jest kompleksem dijądrowym ze stosunkowo długim wiązaniem Os–Os, w związku z czym nomenklatura osmocenowa nie może być dla tego związku stosowana. Natomiast kation  $[\text{Os}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2]^+$  z typową strukturą „kanapkową” nosi nazwę jonu dekametyloosmocenu(1+), przy czym preferowana jest nazwa kation bis(pentametylo- $\eta^5$ -cyklopentadienyl)osmu(1+).

W silnych kwasach protonowych ferrocen występuje w sprotonowanej formie  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{H}]^+$ . Aby uniknąć niejednoznaczności stosuje się w tym przypadku nomenklaturę addytywną, czyli kation bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)wodoróżelazo(1+).

Znane są także kompleksy metali, w których występują pierścieniowe pochodne cyklopentadienu. Nazwy tych związków wywodzą się z nazw alternatywnych odpowiednich węglowodorów, przykładowo 1*H*-inden-1-yl ( $\text{C}_9\text{H}_7$ ), fluoren-9-yl ( $\text{C}_{13}\text{H}_9$ ) i azulen ( $\text{C}_{10}\text{H}_8$ ). W

związku z tym  $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_9\text{H}_7)_2]$  to bis( $\eta^5$ -indenyl)żelazo, czy też nazwa bardziej systematyczna bis[(1-3,3a,7a- $\eta$ )-1*H*-inden-1-yl]żelazo. W celu uniknięcia pomyłek niedopuszczalne są nazwy typu „benzofeocen”.

W wielu przypadkach pierścieniom  $\eta^5$ -cyklopentadienylowym w związku kompleksowym towarzyszą inne ligandy i najczęściej są one określane przez podanie w nazwie członu di(ligand) metalocen, przykładowo  $[\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Cl}_2]$  jest nazywany dichlorkiem tytanocenu. Jednak ta forma nie jest zalecana i należy pamiętać, że może ona być stosowana jedynie do związków, w których pierścienie cyklopentadienylowe są równoległe. Właściwa nazwa  $[\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Cl}_2]$  to dichloridobis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)tytan, a  $[\text{W}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{H}_2]$ ,  $[\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2(\text{CO})_2]$  oraz  $[\text{Zr}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2\text{Me}_2]$  powinny być nazywane odpowiednio bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)diwodorowolfram, dikarbonylbis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)tytan oraz bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)dimetylocyrkon.

$[\text{U}(\eta^8\text{-C}_8\text{H}_8)_2]$  jest nazywany uranoceniem; podobne związki otrzymano dla cyrkonu  $[\text{Zr}(\eta^8\text{-C}_8\text{H}_8)_2]$  i lantanowców np.  $[\text{Ce}(\eta^8\text{-C}_8\text{H}_8)_2]$ . W związkach tych pierścienie węglowodorowe są wzajemnie równoległe co wskazuje na podobieństwa do ferrocenu pod względem opisu wiązań w nich występujących. Jednak niektóre lantanowce na +2 stopniu utlenienia tworzą typowe kompleksy cyklopentadienylowe, jak na przykład  $[\text{Sm}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$  co prowadzi do nieporozumień w przypadku stosowania końcówki „ocen” do  $[\text{U}(\eta^8\text{-C}_8\text{H}_8)_2]$  i jemu podobnych. W związku z tym stosowanie tych nazw jest zabronione.

Dodatkowo pierścień cyklooktatraenowy może być ligandem typu  $\eta^4$ , jak w przypadku  $[\text{Ti}(\eta^4\text{-C}_8\text{H}_8)(\eta^8\text{-C}_8\text{H}_8)]$ , i w związku z tym metaloorganiczne związki cyklooktatraenu powinny być nazywane zgodnie ze standardową nomenklaturą, czyli bis( $\eta^8$ -cyklooktatraen)uran i [(1-4- $\eta$ )-cyklooktatraen]( $\eta^8$ -cyklooktatraen)tytan. Ligand  $\text{C}_8\text{H}_8^{2-}$  jest czasami określany jako „cyklooktatraenyl”. Nazwa ta jest błędna, a oznacza hipotetyczny związek o wzorze  $\text{C}_8\text{H}_7$ .

## IR-10.3 Nomenklatura związków metaloorganicznych pierwiastków grup głównych

### IR-10.3.1 Wprowadzenie

Nomenklatura związków metaloorganicznych pierwiastków grup głównych jest zagadnieniem dopiero opracowywanym w związku z czym w rozdziale tym w formie skrótowej podane zostały główne zagadnienia nazewnictwa tej klasy związków chemicznych.

Generalnie nomenklatura wszystkich związków metaloorganicznych niezależnie czy są to związki metali przejściowych czy grup głównych jest oparta na systemie addytywnym. Przykłady stosowania tego rodzaju nomenklatury przedstawione zostały w rozdziałach IR-7.2 i IR-7.3. Dodatkowo związki boru, krzemu, arsenu i selenu są często rozpatrywane jako metaloorganiczne, a ich nazewnictwo jest najczęściej oparte na podstawieniu odpowiedniej liczby atomów wodoru w wyjściowych wodorkach przez odpowiednie podstawniki.

Rekomendowane jest stosowanie procedury podstawnikowej przy nazewnictwie związków metaloorganicznych pierwiastków grup 13-16, a zasad addytywnych przy pierwiastkach grup 1 i 2. W niektórych przypadkach stosuje się obydwie metody równocześnie, zwłaszcza gdy rozpatrywany jest związek metaloorganicznych posiadający dwa lub więcej atomów centralnych. Ogólne zasady postępowania przedstawione są w rozdziale IR-10.4.

### IR-10.3.2 Związki metaloorganiczne pierwiastków grupy 1 i 2

Związki metaloorganiczne pierwiastków tych grup są nazywane zgodnie z zasadami systemu addytywnego, którego ogólne definicje i zasady podane zostały w części IR-7 oraz



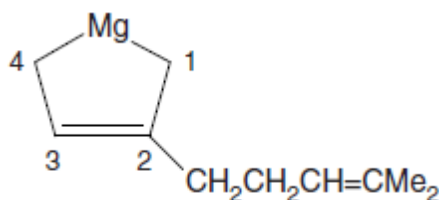
rozdziałach IR-9.1 i IR-9.2. Przedrostki określające grupy organiczne i inne ligandy umieszcza się w porządku alfabetycznym przed nazwą metalu. Prefiksy mogą uzyskać dodatkowe końcówki jak: „ido”, „diido”, itp. czy też „y(i)l”, „diil” (IR-10.2.2 i IR-10.2.3). Dopuszcza się stosowanie nazw zwyczajowych ligandów organicznych. Obecność atomu wodoru związanego z atomem metalu musi być zawsze zaznaczona w nazwie poprzez stosowanie przedrostka hydrido. Nazwy związków cyklicznych z atomem metalu włączonym w pierścień tworzy się przez zastosowanie odpowiednich lokantów dla grup dwuwartościowych „diido” lub „diyl” dla określenia tworzenia układu chelatowego jak na przykładzie 5.

Znaczna ilość związków metaloorganicznych pierwiastków 1 i 2 grupy głównej występuje w postaci asocjatów molekularnych, zawiera cząsteczki rozpuszczalnika lub też występują obydwie formy jednocześnie. Jednak nazwy najczęściej tworzone są w oparciu o skład stechiometryczny, chyba że istnieje konieczność zwrócenia uwagi na rodzaj agregacji, solwentu lub obydwu czynników. Na poniższych przykładach różne nazwy odpowiadają różnicom strukturalnym odpowiadającym ogólnemu wzorowi stechiometrycznemu. Zazwyczaj skład sfery koordynacyjnej jest określony przez pierwiastki zawarte w nawiasach kwadratowych we wzorze związku.

Terminologia metalocenowa (IR-10.2.6) nie jest zalecana dla bis(cyklopentadienylowych) związków metali grup głównych.

Przykłady:

1. [BeEtH]  
etylohydridoberyl lub etanidohydridoberyl
2. Na(CHCH<sub>2</sub>)  
etenidek sodowy (nazwa zgodna ze stechiometrią)  
Na-CH=CH<sub>2</sub>, lub [Na(CH=CH<sub>2</sub>)]  
etenidosód lub etenylosód lub winylosód
3. [Li(OEt)<sub>2</sub>(μ<sub>3</sub>-Ph)]<sub>4</sub>  
tetrakis[(etoksyetan)(μ<sub>3</sub>-fenyl)lit, lub tetrakis[(μ<sub>3</sub>-benzenido)(etoksyetan)lit]
4. 2Na<sup>+</sup>(Ph<sub>2</sub>CCPh<sub>2</sub>)<sup>2-</sup>  
1,1,2,2-tetrafenyloetan-1,2-diid disodowy (nazwa zgodna ze stechiometrią)  
Ph<sub>2</sub>C(Na)-C(Na)Ph<sub>2</sub>  
(μ-1,1,2,2-tetrafenyloetan-1,2-diyl)disód lub  
(μ-1,1,2,2-tetrafenyloetan-1,2-diido-κ<sup>2</sup>C<sup>1</sup>,C<sup>2</sup>)disód



[2-(4-metylopentan-3-en-1-yl)butan-2-en-1,4-diyl]magnez lub  
[2-(4-metylopentan-3-en-1-yl)butan-2-en-1,4-diido-κ<sup>2</sup>C<sup>1</sup>,C<sup>4</sup>]magnez

6. [Mg(η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]  
bis(η<sup>5</sup>-cyklopentadienyl)magnez, lub  
bis(η<sup>5</sup>-cyklopentadienido)magnez

7.  $[\text{PPh}_4][\text{Li}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$   
tetrafenylofosfonian bis( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)litu(1-), lub  
tetrafenylofosfonian bis( $\eta^5$ -cyklopentadienido)litu(1-)
8.  $\text{LiMe}$  metanidek litowy (nazwa zgodna ze stechiometrią)  
 $[\text{LiMe}]$  metylolit  
 $[(\text{LiMe})_4]$  tetra- $\mu_3$ -metyl-tetralit  
 $(\text{LiMe})_n$  poli(metylolit)
9.  $\text{MgIMe}$   
metanidek jodku magnezu (nazwa zgodna ze stechiometrią)  
 $[\text{MgI}(\text{Me})]$   
jodometanidomagnez (konwencja addytywna; związek koordynacyjny)  
 $[\text{MgMe}]\text{I}$   
jodek metylomagnezu  
 $[\text{MgI}(\text{Me})]_n$   
poli[jodometanitomagnez], lub poli[jodometylmagnez]

### IR-10.3.3 Związki metaloorganiczne pierwiastków grup 13-16

Związki metaloorganiczne pierwiastków grup 13-16 są nazywane zgodnie z nomenklaturą podstawnikową wskazaną w części IR-6. Zgodnie z tym do nazwy odpowiedniego wodorku (zgodną z zasadami podanymi w rozdziale IR-6.2) dodaje się przedrostek określający każdy z podstawników zastępujących atom wodoru w wyjściowym wodorku. Należy zwrócić uwagę, że przedrostek powinien być w formie podstawnikowej (chlorido, metylo) a nie w formie pochodzącej od nazwy liganda.

W przypadku różnych ligandów podaje się ich nazwy w kolejności alfabetycznej przed nazwą macierzystego wodorku przy zastosowaniu nawiasów jeżeli jest to konieczne. Wiązania niestandardowe oznaczane są zgodnie z konwencją  $\lambda$  (IR-6.2.2.2). Omówienie zasad nomenklatury podstawnikowej znajduje się w rozdziale IR-6.3.

Przykłady:

- |     |   |   |
|-----|---|---|
| 1.  | $\text{AlH}_2\text{Me}$   | metyloglin                                |
| 2.  | $\text{AlEt}_3$   | etyloglin                                 |
| 3.  | $\text{Me}_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{In}(\text{H})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHMe}$ | bis(3-metylobutylo)indyl                  |
| 4.  | $\text{Sb}(\text{CH}=\text{CH}_2)_3$  | trietenyllostiban, lub triwinylostiban    |
| 5.  | $\text{SbMe}_5$   | pentametylo- $\lambda^5$ -stiban          |
| 6.  | $\text{PhSb}=\text{SbPh}$   | difenylo-diantymonyl                      |
| 7.  | $\text{GeCl}_2\text{Me}_2$  | dichlorodimetylogermanan                  |
| 8.  | $\text{GeMe}(\text{SMe})_3$   | metylotris(metylotio)germanan             |
| 9.  | $\text{BiI}_2\text{Ph}$   | dijodofenylobizmutan                      |
| 10. | $\text{Et}_3\text{PbPbEt}_3$  | heksaetylodiplumban                       |
| 11. | $\text{SnMe}_2$   | dimetylo- $\lambda^2$ -stannan            |
| 12. | $\text{BrSnH}_2\text{SnCl}_2\text{SnH}_2(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)$              | 1-bromo-2,2-dichloro-3-propylo-tristannan |
| 13. | $\text{Me}_3\text{SnCH}_2\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{CSnMe}_3$                         | butan-1-yn-1,4-diylbis(trimetylostannan)  |

W przypadku obecności jednej lub więcej grup charakterystycznych stosuje się odpowiednie przyrostki przed nazwą wyjściowego wodorku (-NH<sub>2</sub>, -OH, -COOH itp.) zgodnie z kolejnością ustaloną przez zastosowane przyrostki; pozostałe podstawniki określają odpowiednie przedrostki zgodnie z regułami podanymi w rozdziale IR-6.3.1. W przypadku gdy związki metali grup 13-16 występują jako podstawniki nazwy odpowiednich wyjściowych wodorków modyfikuje się przez dodanie końcówek „an”, „anyl” („yl” dla pierwiastków grupy 14), „andiyl” itp.

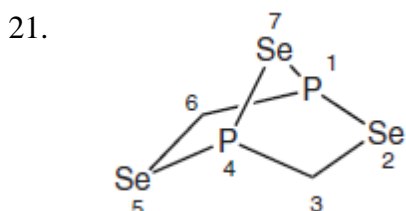
Przykłady:

14. (EtO)<sub>3</sub>GeCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOMe  
3-(trietoksygermanylo)propionian metylu
15. H<sub>2</sub>As(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>SO<sub>2</sub>Cl  
chlorek 4-arsanylobutan-1-sulfonylu
16. OCHCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>GeMe<sub>2</sub>GeGeMe<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CHO  
3,3`-(1,1,2,2-tetrametylodigermanan-1,2-diyl)dipropanal
17. SiMe<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>  
trimetylosilanamina

W pewnych przypadkach koniecznym, czy też wygodniejszym jest rozpatrzenie związku metaloorganicznego jako węglowodoru, w którym niektóre z atomów węgla (cztery lub więcej) zostały zastąpione pierwiastkami grup głównych. W tej metodzie wykorzystuje się zasady nomenklatury zamiennej „a” (Tabela X). Kolejność heteroatomów określa Tabela VI, a w nazwie poprzedzają je odpowiednie lokanty. Zasada numeracji łańcucha jest podana w paragrafie IR-6.2.4.1, a opis nomenklatury znajduje się w *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*.<sup>3</sup>

Przykłady:

18.  $\begin{matrix} 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ \text{MeSiH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{Me} \end{matrix}$   
2,5,8,11-tetrasiladodekan
19.  $\begin{matrix} 2 & 3 & 4 & 5 \\ \text{MeSiH}_2\text{OP(H)OCH}_2\text{Me} \end{matrix}$   
3,5,-dioksa-4-fosfa-2-silaheptan
20.  $\begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ \text{HSCH}=\text{NOCH}_2\text{SeCH}_2\text{ONHMe} \end{matrix}$   
3,7-dioksa-5-selena-2,8-diazanon-1-en-1-tiol



## 2,5,7-triseleno-1,4-difosfabicyklo[2.2.1]heptan

W przypadku pierwiastków grup 13-16 występujących w związkach jednopierścieniowych nomenklatura może zostać oparta na procedurach Hantzsch-Widmana podanych w *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*.<sup>3</sup>

### IR-10.4 Kolejność atomów centralnych w wielordzeniowych związkach metaloorganicznych

W przypadku związków metaloorganicznych zawierających dwa lub więcej różnych atomów metali należy wybrać odpowiedni porządek wymieniania pierwiastków w nazwie związku. Najwygodniej jest rozpocząć od zaklasyfikowania metali do odpowiedniej klasy: (i) należących do grup głównych (1-12) układu okresowego, których nazwy tworzy się zgodnie z regułą addytywną lub (ii) pierwiastków grup 13-16, których nazwy tworzy się zgodnie z regułami systemu podstawnikowego.

#### IR-10.4.1 Atomy centralne należące do grup 1-12

Jeżeli obydwa atomy centralne należą do klasy (i) ich nazewnictwo tworzy się zgodnie z zasadami nomenklatury addytywnej opisanymi w rozdziale IR-9.2.5 łącznie z opisanym tam porządkiem wymieniania nazw atomów centralnych. I tak nazwa systematyczna ferrocenylolitu zgodnie z tymi zasadami to:



Jak widać zostały tu zastosowane obydwie konwencje  $\kappa$  i  $\eta$ .

Inne przykłady związków, w których obydwa atomy centralne należą do klasy (i) są podane w rozdziałach IR-10.2.3.4, IR-10.2.3.5 i IR-10.2.5.1.

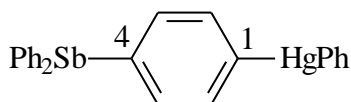
#### IR-10.4.2 Atomy centralne należące do grup 1-12 oraz 13-16 występujące w jednej cząsteczce związku

Jeżeli przynajmniej jeden atom należy do klasy (i) i jednocześnie jeden lub więcej zaliczamy do klasy (ii) stosuje się nomenklaturę addytywną przyjmując atom(y) należące do klasy (i) jako centralny(e). Pozostałe atomy związku metaloorganicznego traktowane są jako ligandy i nazywane zgodnie z przedstawionymi wcześniej zasadami (IR-9.1, IR-9.2 i IR-10.2.1 do IR-10.2.5).

Przykłady:

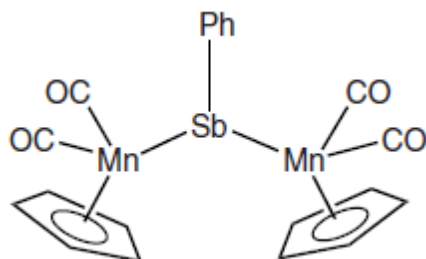
1.  $[\text{Li}(\text{GePh})_3]$   
trifenylogermanyl litu
2.  $(\text{Me}_3\text{Si})_3\text{CMgC}(\text{SiMe}_3)_3$   
bis(tris(trimetylosilyl)metyl)magnez
3.  $[\text{Mo}(\text{CO})_5(=\text{Sn}\{\text{CH}(\text{SiMe}_3)_2\}_2)]$   
{bis[bis(trimetylosilyl)metylo]- $\lambda^2$ -stannyliden}pentakarbonylmolibden

4.



[4-(difenylstibanyl)fenyl](fenylo)rtęć

5.



(fenylostibandiyl)bis[dikarbonyl( $\eta^5$ -cyklopentadienyl)mangan]

### IR-10.4.3 Pierwiastki grup 13-16 jako atomy centralne

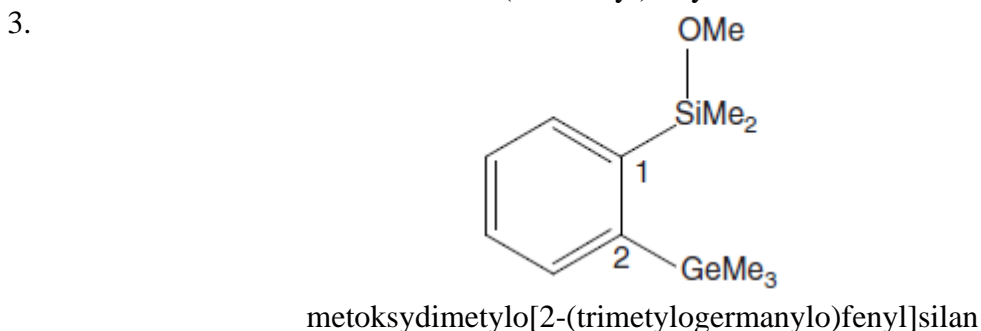
Jeżeli atomy centralne w związku metaloorganicznym zaliczają się do klasy (ii) obowiązuje nomenklatura podstawnikowa (IR-10.3.3 i IR-6.3). Wyboru macierzystego wodorku dokonuje się zgodnie z następującym uszeregowaniem pierwiastków:

$N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Al > Ga > In > Tl > S > Se > Te > C$   
gdzie symbol  $>$  oznacza pierwszeństwo wyboru.

W związku z tym jeżeli w związku występują jednocześnie arsen i ołów to jego nazwa powinna być oparta o  $AsH_3$  a nie  $PbH_4$ ; atom ołowiu pojawia się w nazwie jako podstawnik.

Przykłady:

1.  $As(PbEt_3)_3$   
tris(trietyloplumbyl)arsan



4.  $Et_3PbCH_2CH_2CH_2BiPh_2$   
difenilo[3-(trietyloplumbanyl)propyl]bizmutan
5.  $SiClH_2Sn(Me)=Sn(Me)SiClH_2$   
 $Si, Si^-$ -(1,2-dimetylodistannan)-1,2-diylbis(chlorosilan)

### IR-10.5 BIBLIOGRAFIA

1. *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 1990*, ed. G.J. Leigh, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.
2. *Nomenclature of Organometallic Compounds of the Transition Elements*, A. Salzer, *Pure Appl. Chem.*, **71**, 1557–1585 (1999).

3. *Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations*, eds. W.H. Powell and H. Favre, Royal Society of Chemistry, in preparation.
4. F.A. Cotton, *J. Am. Chem. Soc.*, **90**, 6230–6232 (1968).
5. D.J. Heinekey and W.J. Oldham, Jr., *Chem. Rev.*, **93**, 913–926 (1993).
6. M. Brookhart, M.L.H. Green and L.-L. Wong, *Prog. Inorg. Chem.*, **36**, 1–124 (1988).

## **IR-11 Ciało stałe**

### **Spis treści**

#### **IR-11.1 Wstęp**

##### **IR-11.1.1 Zasady ogólne**

##### **IR-11.1.2 Fazy stechiometryczne i niestechiometryczne**

#### **IR-11.2 Nazwy faz stałych**

##### **IR-11.2.1 Uwagi ogólne**

##### **IR-11.2.2 Nazwy minerałów**

#### **IR-11.3 Skład chemiczny**

##### **IR-11.3.1 Wzory przybliżone**

##### **IR-11.3.2 Fazy o zmiennym składzie**

#### **IR-11.4 Defekty punktowe. notacja Krögera-Vinka**

##### **IR-11.4.1 Uwagi ogólne**

##### **IR-11.4.2 Oznaczanie obsadzonej pozycji węzłowej**

##### **IR-11.4.3 Oznaczanie pozycji w sieci krystalicznej**

##### **IR-11.4.4 Sposób oznaczania ładunku**

##### **IR-11.4.5 Defekty klastrowe oraz stosowanie równań quasi-chemicznych**

#### **IR-11.5 Nomenklatura faz**

##### **IR-11.5.1 Wprowadzenie**

##### **IR-11.5.2 Zalecane oznaczenia**

#### **IR-11.6 Fazy niestechiometryczne**

##### **IR-11.6.1 Wprowadzenie**

##### **IR-11.6.2 Struktury modulowane**

##### **IR-11.6.3 Krystalograficzne struktury ścinania**

##### **IR-11.6.4 Zbliżniaczenie komórki elementarnej lub zbliżniaczenie chemiczne**

##### **IR-11.6.5 Struktury dostosowywalne do składu chemicznego**

##### **IR-11.6.6 Interkalaty**

#### **IR-11.7 Polimorfizm**

##### **IR-11.7.1 Wprowadzenie**

##### **IR-11.7.1.2 Zastosowanie oznaczeń układów krystalograficznych**

#### **IR-11.8 Uwagi końcowe**

#### **IR-11.9 Odnośniki literaturowe**

## IR-11.1 Wstęp

### IR-11.1.1 Zasady ogólne

W tym rozdziale omówione są ogólne aspekty terminologii, nomenklatury i nazewnictwa dotyczące ciał stałych. Należy mieć na uwadze, że skonstruowanie nazwy systematycznej oddającej kompleksowo skład stechiometryczny jest trudne. Próby konstrukcji odpowiedniego nazewnictwa są podane w odnośniku 1.

### IR-11.1.2 Fazy stechiometryczne i niestechiometryczne

W binarnych i złożonych związkach chemicznych występujących jako ciała stałe można wyróżnić, stabilne lub metastabilne, pośrednie fazy krystaliczne, zróżnicowane pod względem termodynamicznym. W niektórych przypadkach, jak na przykład chlorek sodu, skład poszczególnych faz różni się w niewielkim stopniu i uznaje się takie związki za stechiometryczne. Natomiast w innych przypadkach zróżnicowanie składu fazy charakteryzuje się dużą zmiennością. Przykładem jest wustyt, który nominalnie jest tlenkiem żelaza (FeO). W takich przypadkach mówimy o związkach niestechiometrycznych. Na ogół można określić idealny skład stechiometryczny danego związku poprzez uwzględnienie wzajemnego stosunku atomów danego typu wynikający z obsadzenia węzłów w sieci krystalicznej idealnego kryształu. Pojęcie niestechiometryczności jest stosowane również wtedy gdy w obrębie jednej homogenicznej fazy nie da się jednoznacznie określić składu stechiometrycznego substancji. Należy pamiętać, że nie oznacza to występowania niejednorodnych faz o złożonym składzie chemicznym, a dotyczy zmienności składu danej substancji. Zgodnie z tym raczej należałoby traktować tę substancję jako *mieszaninę występującą w fazie stałej*. Określenie *roztwór stały* jest używane w następującym sensie.<sup>2-4</sup> Pojęcie *mieszanina* określa fazę stałą zawierającą więcej niż jedną substancję przy czym wszystkie składniki są traktowane w taki sam sposób. *Roztwór* opisuje substancję ciekłą lub stałą zawierającą jedną lub więcej substancji przy czym jedna lub więcej z tych substancji nosi nazwę *rozpuszczalnika*, i jest traktowana w odrębny sposób od pozostałych określonych jako *substancje rozpuszczone*. W przypadku substancji niestechiometrycznych każdy atom lub grupa atomów mających swój udział w tworzeniu niestechiometryczności są traktowane jednakowo i zgodnie z tym określenie *mieszanina* w stosunku do takich układów jest uzasadnione.

## IR-11.2 Nazwy faz stałych

### IR-11.2.1 Uwagi ogólne

Nazwy stechiometrycznych substancji stałych są standardowe i oparte na zasadach określonych w części IR-5; wzory chemiczne podaje się zgodnie z zasadami przedstawionymi w części IR-4. Pomimo tego, że NaCl jako ciało stałe tworzy nieskończoną sieć złożoną z jednostek (NaCl)<sub>∞</sub> związek nosi nazwę chlorku sodu i jest symbolizowany za pomocą typowego wzoru chemicznego NaCl.

Dla faz niestechiometrycznych i roztworów stałych stosuje się raczej wzory niż nazwy, gdyż te drugie są nieprecyzyjne. Nazwy powinny być stosowane tylko w przypadku gdy są konieczne (np. skorowidze) i powinny być tworzone w sposób analogiczny do podanych poniżej przykładów.

Przykłady:

1. siarczek żelaza(II) (z niedomiarem żelaza)
2. diwęglik molibdenu (z nadmiarem węgla)



### IR-11.2.2 Nazwy minerałów

Nazw mineralogicznych używa się jedynie w wypadku określania konkretnego minerału; nie używa się ich przy definiowaniu składu chemicznego. W związku z tym nazwa kalcyt określa konkretny minerał (w odróżnieniu od innych o zbliżonym składzie) i nie jest określeniem związku chemicznego, którego skład poprawnie określa nazwa węglan wapnia.

Nazwa minerału może w pewnych przypadkach służyć do określenia typu struktury. W przypadkach gdzie jest to możliwe nazwy bardziej ogólne powinny zastępować nazwy szczegółowe. Przykładowo duża grupa minerałów nosi nazwę spineli pomimo znacznych różnic składu atomowego. W tym przypadku zalecana jest nazwa rodzajowa „spinel” zamiast bardziej szczegółowych jak chromit, magnetyt itp. Nazwy ogólne pisane kursywą powinny uzupełniać reprezentatywny wzór chemiczny. Jest to szczególnie ważne w przypadku zeolitów.<sup>5</sup>

Przykłady:

1.  $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  (typ *spinelu*)
2.  $\text{BaTiO}_3$  (typ *perowskitu*)

### IR-11.3 Skład chemiczny

#### IR-11.3.1 Wzory przybliżone

W każdym przypadku wzór chemiczny uzależniony jest od ilości informacji, którą ma zawierać. Ogólna notacja, stosowana nawet wtedy gdy nie jest znany dokładny mechanizm zmiany składu polega na umieszczeniu przed wzorem znaku tyldy (~) czytanej jako „około; w przybliżeniu”.

Przykłady:

1. ~FeS
2. ~CuZn

W przypadkach gdy wymagana jest dokładniejsza informacja stosuje się jedną z zasad podanych poniżej.

#### IR-11.3.2 Fazy o zmiennym składzie

W przypadku faz, w których zmiana składu jest wynikiem częściowego lub całkowitego zastępowania jednych atomów przez drugie, symbole wzajemnie się zastępujących pierwiastków lub grup atomów umieszcza się w nawiasie okrągłym rozdzielone przecinkiem. Tam gdzie jest to możliwe należy podać we wzorze zakres jednorodności fazy.

Przykłady:

1. (Cu,Ni) oznacza całkowity zakres składów od czystego Cu do czystego Ni
2. K(Br,Cl) oznacza składy od czystego KBr do czystego KCl

W ten sam sposób oznacza się fazy, w których podstawienie prowadzi do powstania wakancji.

Przykłady:

3.  $(\text{Li}_2, \text{Mg})\text{Cl}_2$  oznacza roztwór stały o składzie pomiędzy  $\text{LiCl}$  a  $\text{MgCl}_2$
4.  $(\text{Al}_2, \text{Mg}_3)\text{Al}_6\text{O}_{12}$  oznacza roztwór stały o składzie pośrednim pomiędzy  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  ( $=\text{Mg}_3\text{Al}_6\text{O}_{12}$ ) a  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (typ *spinelu*) ( $=\text{Al}_2\text{Al}_6\text{O}_{12}$ )

W ogólności, dla bardziej złożonych układów konieczne jest stosowanie zmiennych określających skład z podaniem zakresów tych zmiennych. Tak więc dla fazy, w której atom A jest zastępowany atomem B zapisuje się  $A_{m+x}B_{n-x}C_p$  ( $0 \leq x \leq n$ ). W takim zapisie przecinki i nawiasy nie są potrzebne.

Przykłady:

5.  $\text{Cu}_x\text{Ni}_{1-x}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) odpowiada  $(\text{Cu}, \text{Ni})$
6.  $\text{KBr}_x\text{Cl}_{1-x}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) odpowiada  $\text{K}(\text{Br}, \text{Cl})$
7.  $\text{Li}_{2-2x}\text{Mg}_x\text{Cl}_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) odpowiada  $(\text{Li}_2, \text{Mg})\text{Cl}_2$  ale pokazuje jednoznacznie, że przy zastąpieniu  $2\text{Li}^+$  przez  $\text{Mg}^{2+}$  powstaje jedna wakancja kationowa
8.  $\text{Co}_{1-x}\text{O}$  wskazuje wakancje kationowe; dla  $x=0$  wzór odpowiada stechiometrycznemu składowi  $\text{CoO}$
9.  $\text{Ca}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_{2-x}$  wskazuje, że Zr jest zastępowany Ca i w rezultacie powstaje wakancja anionowa; dla  $x=0$  wzór odpowiada stechiometrycznemu  $\text{ZrO}_2$

Jeżeli zakres zmiennej  $x$  jest ograniczony, to można użyć symboli  $\delta$  lub  $\varepsilon$  zamiast  $x$ ; konkretny skład zaznacza się przez podanie wartości danej zmiennej ( $x$ ,  $\delta$  lub  $\varepsilon$ ) umieszczonej w nawiasach zaraz po wzorze ogólnym. Można również podać odpowiednie wartości bezpośrednio we wzorze związku. Notacja ta może być stosowana zarówno do substytucyjnych jak i międzywęzłowych roztworów stałych.<sup>6</sup>

Przykłady:

10.  $\text{Fe}_{3x}\text{Li}_{4-x}\text{Ti}_{2(1-x)}\text{O}_6$  ( $x=0.35$ ) lub  $\text{Fe}_{1.05}\text{Li}_{3.65}\text{Ti}_{1.30}\text{O}_6$
11.  $\text{LaNi}_5\text{H}_x$  ( $0 \leq x \leq 6.7$ )
12.  $\text{Al}_4\text{Th}_8\text{H}_{15.4}$
13.  $\text{Ni}_{1-\delta}\text{O}$

## IR-11.4 Defekty punktowe. Nnotacja Krögera-Vinka

### IR-11.4.1 Uwagi ogólne

Wzór, poza składem chemicznym, może zawierać informacje o defektach punktowych, symetrii i obsadzeniu danej pozycji w sieci krystalicznej. Ponadto dodatkowe symbole zawarte we wzorze związku mogą odnosić się do równowag na granicach defektów punktowych.<sup>6</sup>

### IR-11.4.2 Oznaczanie obsadzonej pozycji węzłowej

We wzorze związku element (najczęściej pierwiastek) zajmujący w sieci określoną pozycję jest podawany za pomocą dużych liter. Wakancje oznacza się pisaną kursywą literą  $V$  (zastosowanie kursywy jest celowe ze względu na symbol wanadu; do oznaczania pozycji nie zajętych stosuje się również symbol  $\square$  jednak nie jest on zalecany).

Pozycje i obsadzenia w idealnej sieci krystalicznej określają dolne indeksy po prawej stronie symbolu pierwiastka we wzorze. Pierwszy element indeksu oznacza rodzaj miejsca, drugi oddzielony przecinkiem podaje ilość atomów w danej pozycji. W ten sposób atom A zajmujący pozycję A w idealnej sieci krystalicznej jest oznaczany jako  $A_A$ ; jeżeli atom A zajmuje pozycję normalnie obsadzoną przez B zapisuje się to jako  $A_B$ ;  $M_{M,1-x}N_{M,x}M_{N,x}N_{N,1-x}$  oznacza nieuporządkowany stop, o składzie idealnym  $M_MN_N$ , w którym atomy M zajmują jeden rodzaj miejsc w strukturze krystalicznej, a N zajmują drugi rodzaj pozycji. Alternatywny sposób zapisu nieuporządkowania przedstawia wzór:  $(M_{1-x}N_x)_M(M_xN_{1-x})_N$ . Zajęte pozycje międzywęzłowe oznacza się dolnym indeksem „i”.

Przykłady:

1.  $Mg_{Mg,2-x}Sn_{Mg,x}Mg_{Sn,x}Sn_{Sn,1-x}$  oznacza nieuporządkowanie w  $Mg_2Sn$  gdzie część atomów Mg zajmuje pozycje cyny, a część atomów Sn zajmuje pozycje magnezu
2.  $(Bi_{2-x}Te_x)_{Bi}(Bi_xTe_{3-x})_{Te}$  wskazuje na  $Bi_2Te_3$ , w którym niektóre atomy Bi zajmują pozycje Te i odwrotnie
3.  $Na_{Na,1-x}V_{Na,x}Cl_{Cl,1-x}V_{Cl,x}$  określa układ, w którym  $x$  pozycji Na i  $x$  pozycji Cl w NaCl jest nieobsadzonych tworząc defekty Schottky'ego
4.  $Ca_{Ca,1}F_{F,2-x}V_{F,x}F_{i,x}$  oznacza, że w strukturze  $CaF_2$   $x$  miejsc fluoru jest nieobsadzonych, a  $x$  atomów fluoru zajmuje pozycje międzywęzłowe tworząc defekty Frenkla
5.  $(Ca_{0,15}Zr_{0,85})_{Zr}(O_{1,85}V_{0,15})_O$  lub  $Ca_{Zr,0,15}Zr_{Zr,0,85}O_{O,1,85}V_{O,0,15}$  oznacza tlenek wapnia CaO stabilizowany  $ZrO_2$ , w którym 0,85 miejsc cyrkonu obsadzają atomy Zr, 0,15 obsadza wapń i że z dwóch miejsc tlenu 1,85 jest obsadzonych atomami tlenu, a 0,15 pozostaje pustych
6.  $V_{V,1}C_{C,0,8}V_{C,0,2}$  oznacza, że 0,2 miejsc węgla w węglu wanadu jest nieobsadzone.

Symbole defektów mogą być stosowane przy zapisywaniu równań reakcji quasi-chemicznych.

Przykłady:

7.  $Na_{Na} \rightarrow V_{Na} + Na(g)$  oznacza przejście atomu sodu do fazy gazowej z pozostawieniem wakancji w sieci krystalicznej
8.  $0,5Cl_2(g) + V_{Cl} \rightarrow Cl_{Cl}$  określa wbudowanie atomu chloru do wakancji chloru w sieci

### IR-11.4.3 Oznaczanie pozycji w sieci krystalicznej

Pozycje krystalograficzne oznacza się poprzez dolne indeksy, przy czym skróty tet, okt i dod oznaczają odpowiednio koordynację tetraedryczną, oktaedryczną i dodekaedryczną. Stosowanie indeksów a, b, ... itp. nie zawierających konkretnego odniesienia nie jest zalecane.

W przypadku tlenków czy siarczków ilość indeksów może zostać zredukowana przez zastosowanie odpowiednich symboli na oznaczenie symetrii. I tak dla miejsc tetraedrycznych stosuje się nawiasy okrągłe (), dla oktaedrycznych nawiasy kwadratowe [], a dla lokalizacji dodekaedrycznej {}. Oczywiście jest, że symboli tych nie można stosować gdy we wzorze występuje konieczność oznaczenia wielokrotności wyszczególnionych fragmentów za pomocą nawiasów. Znaczenie symboli musi zostać jasno określone w tekście towarzyszącym wzorom.

Przykłady:

1.  $Mg_{tet}Al_{oct,2}O_4$  lub  $(Mg)[Al_2]O_4$  oznacza spinel normalny
2.  $Fe_{tet}Fe_{oct}Ni_{oct}O_4$  lub  $(Fe)[FeNi]O_4$  oznacza  $NiFe_2O_4$  (typ *spinelu odwrotnego*)

#### IR-11.4.4 Sposób oznaczania ładunku

Ładunki oznacza się za pomocą górnego indeksu po prawej stronie wzoru. Ładunek formalny oznacza się według normalnej konwencji: jednostka ładunku dodatniego oznaczana jest za pomocą znaku +;  $n$  jednostek ładunku dodatniego oznacza się jako  $n+$ ; jednostkę ładunku ujemnego oznacza indeks -;  $n$  jednostek ładunku ujemnego oznacza się za pomocą indeksu  $n-$ . W związku z tym symbol  $A^{n+}$  oznacza  $n$  jednostek formalnie dodatniego ładunku zlokalizowanych na atomie A. W chemii defektów zazwyczaj podaje się ładunki w odniesieniu do idealnego, niezaburzonego kryształu. W takich przypadkach noszą one nazwę *ładunków efektywnych*. Jednostka dodatniego ładunku efektywnego oznaczana jest kropką podaną w górnym indeksie, •, której nie należy mylić z oznaczeniem rodniczka (Rozdział IR-4.6.2). Jednostkę efektywnego ładunku ujemnego oznacza się znakiem prim `;  $n$  jednostek oznacza się odpowiednio jako  ${}^{\prime\prime}$  lub  ${}^{\prime\prime\prime}$ . Dopuszczalne jest użycie podwójnej kropki  ${}^{\prime\prime}$  lub podwójnego znaku prim  ${}^{\prime\prime}$  na oznaczenie dwóch ładunków efektywnych. I tak  $A^{2\prime}$  lub  $A^{\prime\prime}$  oznacza atom o symbolu A posiadający dwa dodatnie ładunki efektywne. Lokalizacje, które nie mają ładunków efektywnych w stosunku do niezaburzonego kryształu mogą być oznaczone przez znak x w górnym indeksie, czyli  $x$ .

Przykłady:

1.  $Li_{Li,1-2x}Mg_{Li,x}V_{Li,x}Cl_{Cl}$  i  $Li_{Li,1-2x}^xMg_{Li,x}^{\bullet}V_{Li,x}^{\bullet}Cl_{Cl}^x$  oznaczają ten sam substytucyjny roztwór stały  $MgCl_2$  w  $LiCl$
2.  $Y_{Y,1-2x}Zr_{Y,2x}O_{i,x}O_3$  i  $Y_{Y,1-2x}^xZr_{Y,2x}^{\bullet}O_{i,x}^{\bullet}O_3^x$  są równoważnymi wzorami międzywęzłowego roztworu stałego  $ZrO_2$  w  $Y_2O_3$
3.  $Ag_{Ag,1-x}V_{Ag,x}Ag_{i,x}Cl_{Cl}$  oznacza, że  $x$  jonów  $Ag^+$  zostało przeniesionych do pozycji międzywęzłowych pozostawiając  $x$  wakancji

Podawanie ładunków formalnych preferuje się w przypadkach gdy w kryształach niezaburzonych występuje pierwiastek na więcej niż jednym stopniu utlenienia.

Przykłady:

4.  $La_{La,1-3x}^{2+}La_{La,2+2x}^{3+}V_{La,x}(S^{2-})_4$  ( $0 < x < 1/3$ )

5.  $\text{Cu}_{\text{Cu},2-x}^+ \text{Fe}_{\text{Cu},x}^{3+} \text{Tl}_{\text{Tl}}^+ \text{Se}_{\text{Se},1+2x}^{2-} \text{Se}_{\text{Se},1-2x}^-$  ( $0 < x < 1/2$ ) wskazuje, że  $\text{Fe}^{3+}$  częściowo zastępuje jon  $\text{Cu}^+$  w  $\text{Cu}^+ \text{Tl}^+ \text{Se}^{2-} \text{Se}^-$

Wolne elektrony oznaczane są jako  $e^-$  a wolne dziury symbolem  $h^\bullet$ . Ponieważ makroskopowy kryształ jest elektrycznie obojętny to suma ładunków formalnych jak i efektywnych musi wynosić zero.

**Tabela IR-11.1** Przykłady<sup>a</sup> oznaczeń defektów w  $M^{2+}(X^-)_2$  zawierającym obcy jon Q

jon międzywęzłowy $M^{2+}$	$M_i^{\bullet\bullet}$	wakancja atomu M	$V_M^x$
jon międzywęzłowy $X^-$	$X_i^-$	wakancja atomu X	$V_X^x$
wakancja jonu $M^{2+}$	$V_M^{\bullet\bullet}$	jon $M^{2+}$ w pozycji normalnej	$M_M^x$
wakancja jonu $X^-$	$V_M^\bullet$	jon $X^-$ w pozycji normalnej	$M_X^x$
międzywęzłowy atom M	$M_i^x$	jon $Q^{3+}$ w miejscu jonu $M^{2+}$	$Q_M^\bullet$
międzywęzłowy atom X	$X_i^x$	jon $Q^{2+}$ w miejscu jonu $M^{2+}$	$Q_M^x$
międzywęzłowy jon $M^+$	$M_i^\bullet$	jon $Q^+$ w miejscu jonu $M^{2+}$	$Q_M^-$
wakancja jonu $M^+$	$V_M^-$	swobodny elektron	$e^-$
		swobodna dziura	$h^\bullet$

<sup>a</sup> Rozważmy przykład związku jonowego  $M^{2+}(X^-)_2$ . M ma formalny ładunek  $2+$ , a X formalny ładunek  $-$ . Jeżeli usunie się atom X, jednostkowy ładunek ujemny pozostaje na wakancji po atomie X. Wakancja jest obojętna w stosunku do idealnej sieci  $\text{MX}_2$  i dlatego jest oznaczana  $V_X$  lub  $V_X^x$ . Jeżeli usunie się również elektron z tego miejsca w sieci, wakancja przyjmuje efektywny ładunek dodatni względem sieci, tj.  $V_X^\bullet$ . Podobnie, usunięcie atomu M pozostawia  $V_M$ , usunięcie jonu  $M^+$  pozostawia  $V_M^-$ , a usunięcie jonu  $M^{2+}$  pozostawia  $V_M^{\bullet\bullet}$ . Jeżeli domieszka z formalnym ładunkiem równym trzem dodatnim jednostkom  $Q^{3+}$  podstawia jon  $M^{2+}$ , jej efektywny ładunek jest równy jednej jednostce ładunku dodatniego. Stąd defekt ten jest oznaczany  $Q_M^\bullet$ .

#### IR-11.4.5 Klastery (klastry?) defektów oraz stosowanie równań quasi-chemicznych

W ciele stałym mogą występować pary lub większe ugrupowania (klastry) defektów. Symbole takich defektów oznacza się umieszczając je w nawiasach, a ładunek efektywny podaje w postaci górnego indeksu z prawej strony nawiasu zamykającego.

Przykłady:

1.  $(\text{Ca}_K^\bullet V_K^-)^x$  oznacza obojętną parę defektów w roztworze stałym  $\text{CaCl}_2$  i  $\text{KCl}$
2.  $(V_{\text{Pb}}^{\bullet\bullet} V_{\text{Cl}}^\bullet)$  lub  $(V_{\text{Pb}} V_{\text{Cl}}^\bullet)$  oznacza parę wakancji w  $\text{PbCl}_2$  o ładunku ujemnym

Reakcje quasi-chemiczne tworzenia klastrów defektów można zapisać stosując powyższą notację.

Przykłady:

3.  $\text{Cr}_{\text{Mg}}^{\bullet} + V_{\text{Mg}}^{\ddot{}} \rightarrow (\text{Cr}_{\text{Mg}} V_{\text{Mg}})$  opisuje reakcję asocjacji domieszkowego jonu  $\text{Cr}^{3+}$  z wakancją magnezową w  $\text{MgO}$
4.  $\text{Cr}_{\text{Mg}}^{\bullet} + V_{\text{Mg}}^{\ddot{}} \rightarrow (\text{Cr}_{\text{Mg}} V_{\text{Mg}} \text{Cr}_{\text{Mg}})^x$  przedstawia inną reakcję asocjacji jaka może zachodzić w przykładzie 3
5.  $\text{Gd}_{\text{Ca}}^{\bullet} + \text{F}_i^{\cdot} \rightarrow (\text{Gd}_{\text{Ca}} \text{F}_i)^x$  opisuje tworzenie dipola z domieszki  $\text{Gd}^{3+}$  i międzywęzłowego jonu fluorkowego w  $\text{CaF}_2$

## IR-11.5 Nomenklatura faz

### IR-11.5.1 Wprowadzenie

Stosowanie notacji Pearsona (zob. także IR-3.4.4) jest zalecane do określenia struktury metali i roztworów stałych w dwuskładnikowych i bardziej złożonych układach. Nie zaleca się stosowania liter greckich ani innych oznaczeń nie zawierających konkretnej informacji.

### IR-11.5.2 Zalecane oznaczenia

Symbol Pearsona składa się z trzech części: pierwsza to mała litera pisana kursywą (*a*, *m*, *o*, *t*, *h*, *c*) oznaczająca układ krystalograficzny; druga to duża litera pisana kursywą (*P*, *S*, *F*, *I*, *R*) oznacza typ sieci i trzecia część w postaci liczby określającej ilość atomów w komórce elementarnej. Podsumowanie tego systemu znajduje się w Tabeli IR-3.1.

Przykłady:

1. Cu, symbol (*cF4*) oznacza miedź o symetrii regularnej w sieci ściennie (płasko) centrowanej zawierającej 4 atomy miedzi w komórce elementarnej
2. NaCl, symbol (*cF8*) oznacza sieć regularną ściennie (płasko) centrowaną z 8 atomami w komórce elementarnej
3. CuS(*hP12*) oznacza prymitywną sieć heksagonalną z 12 atomami w komórce elementarnej.

Jeżeli występuje taka konieczność można po symbolu Pearsona podać grupę przestrzenną oraz typ sieci.

Przykład:

4.  $\text{CaMg}_{0,5}\text{Ag}_{1,5}(\text{hP12}), P6_3/mmc$  (typu  $\text{MgZn}_2$ )

## IR-11.6 Fazy niestechiometryczne

### IR-11.6.1 Wprowadzenie

Wiele problemów nomenklaturowych powstało wraz z rozwojem precyzji badań strukturalnych. W wielu pracach znajduje się odniesienia do szeregów homologicznych, struktur niewspółmiernych oraz częściowo niewspółmiernych, struktur Verniera, krystalograficznych struktur ścinania, defektów Wadsleya, faz chemicznie zbliżonych, ciągłych fazach adaptacyjnych i fazach modulowanych. Dla wielu tego rodzaju faz nie daje się

określić zakresu zmian składu chociaż ich struktury i skład są złożone; przykładowo  $\text{Mo}_{17}\text{O}_{47}$ . Fazy te, pomimo skomplikowanych wzorów chemicznych, są układami stechiometrycznymi, a złożony wzór chemiczny nie jest elementem dowodzącym ich niestechiometrii (zobacz IR-11.1.2).

### IR-11.6.2 Struktury modulowane

Struktury modulowane wykazują dwa lub więcej elementów powtarzających się periodycznie w określonym kierunku w przestrzeni. Jeżeli stosunek periodów jest liczbą wymierną fazy te nazywamy *współmiernymi*; w przypadku niewymiernego stosunku periodów fazy noszą nazwę *niewspółmiernych*. Współmiernie modulowane struktury występują w wielu stechiometrycznych i niestechiometrycznych związkach; można je traktować jako nadstruktury i rozpatrywać w oparciu o zwykłe reguły. Niewspółmierne struktury modulowane występują w niektórych związkach stechiometrycznych (i pierwiastkach), zazwyczaj w ograniczonym zakresie temperatur, przykładowo: U,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TaS}_2$ ,  $\text{NbSe}_3$ ,  $\text{NaNO}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  i  $\text{Rb}_2\text{ZnBr}_4$ .

Wiele struktur modulowanych może być rozpatrywanych jako złożone z dwóch lub więcej podstruktur. Podstruktura o najkrótszym okresie zazwyczaj jest prostą *strukturą podstawową* a inne powtórzenia powodują jej modyfikację. Struktura podstawowa często pozostaje niezmienna w pewnym zakresie składu podczas gdy inne podstruktury ulegają zmianie wraz ze zmianą stechiometrii. Jeżeli zmiana taka zachodzi w sposób ciągły powstaje faza niestechiometryczna z niewspółmierną strukturą. Jeżeli zmiany zachodzą w sposób nieciągły może tworzyć się szereg (zasadniczo stechiometrycznych) *związków homologicznych*, ze strukturami współmiernymi (nadstruktury struktury podstawowej) lub w fazach pośrednich szereg związków o strukturze *częściowo współmiernej* lub strukturze *Verniera*.

Przykłady:

1.  $\text{Mn}_n\text{Si}_{2n-m}$  - związek o strukturze typu  $\text{TiSi}_2$  charakteryzującej się obecnością dwóch podstruktur atomowych. Atomy Mn obsadzają te same pozycje co Ti w  $\text{TiSi}_2$ ; Si<sub>2</sub> zajmują te same pozycje co w  $\text{TiSi}_2$ . Usunięcie atomu krzemu prowadzi do  $\text{Mn}_n\text{Si}_{2n-m}$ , w którym atomy Mn pozostają nie zmienione. Atomy krzemu są ułożone w szeregi i gdy ilość Si spada ulegają one rozsunięciu wzdłuż szeregu. W takim przypadku występuje zależność Verniera pomiędzy szeregami atomów krzemu i nie zmienionymi pozycjami Mn. Jednak pod wpływem zmian składu zmieniają się pozycje manganu co prowadzi do powstania struktur niewspółmiernych.
2.  $\text{YF}_{2+x}\text{O}$  – struktura typu *fluorytu* z dodatkowymi warstwami atomów pomiędzy wyjściową strukturą  $\text{YX}_2$ . W przypadku uporządkowanych warstw powstaje seria homologicznych faz. Natomiast w przypadku nieuporządkowania pojawia się faza niestechiometryczna i niewspółmierna; częściowe uporządkowanie prowadzi do efektu Verniera lub częściowej współmierności. Inne struktury warstwowe można traktować w ten sam sposób.

*Struktury niedopasowyalne* można traktować jako składające się z dwóch lub więcej elementów często wzajemnie niewspółmiernych, związanych siłami elektrostatycznymi lub oddziaływaniami innego rodzaju. W takich układach nie występuje struktura podstawowa. Skład związków ze strukturą niedopasowaną jest definiowany przez stosunek periodów jednostek strukturalnych oraz obojętność elektryczną.

Przykłady:

3.  $Sr_{1-p}Cr_2S_{4-p}$  gdzie  $p=0,29$  a łańcuchy o składach  $Sr_3CrS_3$  oraz  $Sr_{3-x}S$  leżą w kanałach sieci o składzie  $Cr_{21}S_{36}$ . Te trzy jednostki strukturalne są wzajemnie niewspółmierne.
4.  $LaCrS_3$  zbudowane z niewspółmiernych warstw  $(LaS)^+$  i  $(CrS_2)^-$ .

### IR-11.6.3 Krystalograficzne struktury ścinania

Krystalograficzne płaszczyzny ścinania (płaszczyzny  $CS$ ) są płaskimi defektami sieciowymi oddzielającymi dwie części kryształu przemieszczone względem siebie. Wektor przemieszczenia nazywany jest krystalograficznym wektorem ścinania (wektor  $CS$ ). Każda płaszczyzna ścinania powoduje niewielką zmianę składu kryształu, ponieważ sekwencja płaszczyzn krystalograficznych, tworzących matrycę kryształu ulega zmianie w tej płaszczyźnie. (Z tego wynika, że wektor ścinania musi być ustawiony pod kątem do płaszczyzny ścinania. Gdyby był on równoległy do tej płaszczyzny kolejność płaszczyzn krystalograficznych nie ulegałaby zmianie i nie mogłaby nastąpić zmiana składu. Płaska granica, w której wektor przesunięcia jest równoległy do płaszczyzny, jest nazywana *granicą antyfazową*.)

Ponieważ każda płaszczyzna  $CS$  w niewielkim stopniu zmienia skład kryształu, ostateczny skład kryształu zależy od liczby płaszczyzn  $CS$  oraz ich orientacji. Jeżeli płaszczyzny ścinania są nieuporządkowane kryształ będzie niestechiometryczny, a zmiany stechiometrii wynikają z defektów pochodzących od płaszczyzn ścinania. Jeżeli płaszczyzny  $CS$  są równolegle uporządkowane powstaje stechiometryczna faza o złożonym składzie. Zmiana odległości płaszczyzn w tym układzie powoduje powstanie nowej fazy o nowym składzie. Szereg faz powstających w wyniku zmiany odległości pomiędzy płaszczyznami  $CS$  prowadzi do utworzenia *szeregu homologicznego*. Ogólny wzór tego szeregu zależy od typu płaszczyzn  $CS$  i odległości pomiędzy nimi. Zmiana w płaszczyźnie  $CS$  może zmienić wzór szeregu homologicznego.

Przykłady:

1.  $Ti_nO_{2n-1}$  struktura macierzysta  $TiO_2$  (typ *rutylu*). Płaszczyzny ścinania są płaszczyznami (121). Może występować uporządkowanie płaszczyzn  $CS$  tworząc szereg homologiczny tlenków o wzorach:  $Ti_4O_7$ ,  $Ti_5O_9$ ,  $Ti_6O_{11}$ ,  $Ti_7O_{13}$ ,  $Ti_8O_{15}$  i  $Ti_9O_{17}$ . Szereg ma wzór  $Ti_nO_{2n-1}$  z  $n$  zawartym pomiędzy 4 a 9.
2.  $(Mo,W)_nO_{3n-1}$  struktura macierzysta  $WO_3$ ; płaszczyzny  $CS$  są płaszczyznami (102); uporządkowanie płaszczyzn może prowadzić do szeregu tlenków  $Mo_8O_{23}$ ,  $Mo_9O_{26}$ ,  $(Mo,W)_{10}O_{29}$ ,  $(Mo,W)_{11}O_{32}$ ,  $(Mo,W)_{12}O_{35}$ ,  $(Mo,W)_{13}O_{38}$  i  $(Mo,W)_{14}O_{41}$ . Wzór szeregu:  $(Mo,W)_nO_{3n-1}$  z  $n$  zawartym pomiędzy 8 a 14.
3.  $W_nO_{3n-2}$  struktura macierzysta  $WO_3$ ; płaszczyzny  $CS$  są płaszczyznami (103); uporządkowanie płaszczyzn może prowadzić do szeregu tlenków o wzorze ogólnym  $W_nO_{3n-2}$  z  $n$  pomiędzy 16 i 25.

### IR-11.6.4 Zbliżniaczenie komórki elementarnej lub zbliżniaczenie chemiczne

Zbliżniaczenie jest elementem strukturalnym, w którym dwie tworzące go części są odbiciem zwierciadlanym w stosunku do granicy faz. Płaszczyzna zbliżniaczenia zmienia skład chemiczny kryształy o określoną wartość (może ona wynosić zero). Uporządkowane, blisko



siebie położone płaszczyzny zbliźniaczenia prowadzą do utworzenia homologicznych szeregów faz. Nieuporządkowane płaszczyzny zbliźniaczenia prowadzą do powstania faz niestechiometrycznych, w których płaszczyzny zbliźniaczenia są defektami. Istnieje bliska analogia pomiędzy zbliźniaczeniem chemicznym a krystalograficznym ścinaniem (patrz Rozdział IR-11.6.3).

Przykład:

1.  $(\text{Bi,Pb})_n\text{S}_{n-4}$  struktura macierzysta PbS o strukturze  $cF8$  (typ  $\text{NaCl}$ ). Płaszczyzny zbliźniaczenia (311) komórki macierzystej PbS. Znane są dwa człony szeregu homologicznego;  $\text{Bi}_8\text{Pb}_{24}\text{S}_{36}$  i  $\text{Bi}_8\text{Pb}_{12}\text{S}_{24}$  ale w czteroskładnikowym układzie Ag-Bi-Pb-S znaleziono inne człony tego szeregu. Różnica między związkami wynika z różnej odległości płaszczyzn zbliźniaczenia; każda struktura jest zbudowana z płytek PbS o różnej grubości, przy czym sąsiednie płytki są zbliźnione wzdłuż płaszczyzny (311) w stosunku do struktury macierzystej.

### IR-11.6.5 Struktury dostosowywalne do składu chemicznego

W niektórych układach występuje taka sytuacja, że dla każdego składu chemicznego daje się przyporządkować w pełni uporządkowaną strukturę krystaliczną trwałą w ramach określonego zakresu temperatur. Zmiana składu powoduje zmianę struktury dostosowaną do nowego składu chemicznego. Dla takich związków stosuje się termin *struktury dostosowywalne do składu chemicznego*.<sup>8</sup>

Przykłady:

1. Związki w układzie  $\text{Cr}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$  w zakresie składów od  $(\text{Cr,Ti})\text{O}_{2,93}$  do  $(\text{Cr,Ti})\text{O}_{2,90}$ .
2. Związki w układzie  $\text{Nb}_2\text{O}_5\text{-WO}_3$  o strukturze blokowej w obrębie składu od  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  a  $8\text{WO}_3\cdot 9\text{Nb}_2\text{O}_5$  ( $\text{Nb}_{18}\text{W}_8\text{O}_{69}$ ).

### IR-11.6.6 Interkalaty

Istnieje szereg materiałów, w których w matrycy macierzystej znajdują się inne związki na zasadzie „gościa”. Proces tworzenia takich substancji nosi nazwę interkalacji, a powstające produkty nazywane są *związkami interkalowymi*. (Określenie interkalat odnosi się zazwyczaj do nazwy gościa w matrycy.) Najczęstszymi przykładami materiałów interkalowanych są ility krzemianowe, warstwowe dichalkogenki, materiały elektrodowe używane w bateriach litowych; zagadnienia związane z interkalowanym grafitem zostały szeroko omówione w cytowanej literaturze.<sup>9</sup> Materiały interkalowane można określać przy użyciu standardowych wzorów, jak np.  $\text{Li}_x\text{TaS}_2$  ( $0 < x < 1$ ), lub stosując notację typu gospodarz-gość, np.  $\text{TaS}_2\text{:Li}_x$  ( $0 < x < 1$ ). Jeżeli określona jest stechiometria stosuje się typowe wzory związku chemicznego jak np.  $3\text{TaS}_2\cdot 4\text{N}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}\cdot 2\text{TiSe}_2$  i  $\text{KC}_8$ .

Wiele związków interkalowanych charakteryzuje się strukturą warstwową i w związku z tym sam proces interkalacji ma charakter procesu dwuwymiarowego. Natomiast w przypadkach gdy mamy do czynienia z procesem wbudowania atomu, jonu czy cząsteczki gościa do komórki elementarnej związku macierzystego (brązy wolframowe -  $\text{Na}_x\text{WO}_3$ , spinele -  $\text{Li}_x\text{Mn}_2\text{O}_4$ ) mówimy o procesach *insercji*. Innymi słowy pojęcie interkalacji odnosi się do reakcji która nie powoduje znacznych zmian strukturalnych w obrębie matrycy macierzystej, natomiast w wyniku insercji następuje znaczna modyfikacja struktury matrycy macierzystej polegająca na przykład na zerwaniu wiązań w obrębie związku macierzystego. Tak więc reakcje insercji są przykładami reakcji *topochemicznych* czy też *topotaktycznych*.<sup>4</sup>

## IR-11.7 Polimorfizm

### IR-11.7.1 Wprowadzenie

Struktura krystaliczna znacznej liczby związków chemicznych, a nawet pierwiastków ulega zmianom w zależności od warunków zewnętrznych takich jak np. temperatura i ciśnienie. Te różne struktury nazywane są formami lub modyfikacjami polimorficznymi i w przeszłości oznaczane były literami greckimi i liczbami rzymskimi. Taki, niesystematyczny, sposób identyfikacji odmian polimorficznych nie jest dopuszczalny w nomenklaturze, a jako obowiązujący należy stosować system oparty o zasady określania struktury krystalicznej w każdym przypadku gdy jest to możliwe (por. IR-3.4.4 i IR-4.2.5)

Jako specjalną formę polimorfizmu można rozpatrywać politypy, których szczegółowe omówienie znajduje się w cytowanej literaturze.<sup>10</sup>

### IR-7.1.2 Zastosowanie oznaczeń układów krystalograficznych

Odmiany polimorficzne określa się poprzez dodanie po wzorze chemicznym symbolu układu krystalograficznego zapisanego kursywą zgodnie z symboliką podaną w Tabeli IR-3.1. Przykładowo: ZnS(*c*) odpowiada strukturze blendy cynkowej lub sfalerytu, a ZnS(*h*) strukturze wurcytu. Struktury zaburzone w niewielkim stopniu można oznaczać stosując znak tyldy (~) czytany jako „około”. W związku z tym struktura regularna w niewielkim stopniu zaburzona jest oznaczana jako (~*c*). Dla pełniejszego określenia struktury związku powinno się, dla znanych struktur, podawać w nawiasie typ związku. Przykładowo, AuCd w temperaturze około 343 K powinien być oznaczony jako AuCd (typu *CsCl*) zamiast AuCd(*c*).

Właściwości silnie zależne od typu sieci przestrzennej czy symetrii punktowej mogą wymagać dodania symbolu grupy przestrzennej po symbolu układu krystalograficznego.<sup>11</sup>

### IR-11.8 Uwagi końcowe

Zagadnienia przedstawione w powyższym rozdziale dotyczą podstawowych zasad nomenklatury w zakresie chemii ciała stałego. W niektórych obszarach tej dziedziny, takich, jak układy amorficzne i szkła wymagane jest bardziej szczegółowe opracowanie zasad nomenklaturowych. Czytelnik zainteresowany tymi zagadnieniami powinien odnieść się do prac sygnowanych przez Międzynarodową Unię Krystalograficzną (IUCr).

### IR-10.5 Odnośniki literaturowe

1. Nomenclature of Inorganic Structure Types, J. Lima-de-Faria, E. Hellner, F. Liebau, E. Makovicky and E. Parthé, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **46**, 1–11 (1990).
2. M.L. McGlashan, *Chemical Thermodynamics*, Academic Press, London, 1979, pp. 35–36.
3. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, Second Edn., eds. I. Mills, T. Cvitas, K. Homann, N. Kallay and K. Kuchitsu, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993, p. 53. (The Green Book. The third edition is planned for publication in 2006.)
4. *Compendium of Chemical Terminology, IUPAC Recommendations*, Second Edn., eds. A.D. McNaught and A. Wilkinson, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997. (The Gold Book.)

5. Chemical Nomenclature and Formulation of Compositions of Synthetic and Natural Zeolites, R.M. Barrer, *Pure Appl. Chem.*, **51**, 1091–1100 (1979).
6. F.A. Kröger and H.J. Vink, *Solid State Phys.*, **3**, 307–435 (1956).
7. W.B. Pearson, *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*, Vol. 2, Pergamon Press, Oxford, 1967, pp. 1–2. For tabulated lattice parameters and data on elemental metals and semi-metals, see pp. 79–91. See also, P. Villars and L.D. Calvert, *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, Vols. 1–3, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, USA, 1985.
8. J.S. Anderson. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 1107–1115 (1973).
9. Graphite Intercalation Compounds, Chapter II-6 in *Nomenclature of Inorganic Chemistry II, IUPAC Recommendations 2000*, eds. J.A. McCleverty and N.G. Connelly, Royal Society of Chemistry, 2001.
10. Nomenclature of Polytype Structures, A. Guinier, G.B. Bokij, K. Boll-Dornberger, J.M. Cowley, S. Durovic, H. Jagodzinski, P. Krishna, P.M. de Wolff, B.B. Zvyagin, D.E. Cox, P. Goodman, Th. Hahn, K. Kuchitsu and S.C. Abrahams, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **40**, 399–404 (1984). See also, S.W. Bailey, V.A. Frank-Kamenetskii, S. Goldsztaub, A. Kato, A. Pabst, H. Schulz, H.F.W. Taylor, M. Fleischer and A.J.C. Wilson, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **33**, 681–684 (1977).
11. Structural Phase Transition Nomenclature, J.-C. Tolédano, A.M. Glazer, Th. Hahn, E. Parthé, R.S. Roth, R.S. Berry, R. Metselaar and S.C. Abrahams, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **54**, 1028–1033 (1998). Nomenclature of magnetic, incommensurate, composition-changed morphotropic, polytype, transient-structural and quasicrystalline phases undergoing phase transitions, J.-C. Tolédano, R.S. Berry, P.J. Brown, A.M. Glazer, R. Metselaar, D. Pandey, J.M. Perez-Mato, R.S. Roth and S.C. Abrahams, *Acta Crystallogr., Sect. A*, **57**, 614–626 (2001), and erratum in *Acta Crystallogr., Sect. A*, **58**, 79 (2002).