



Universidad de Jaén

Facultad de Ciencias Experimentales

Nomenclatura de compuestos químicos. Normas IUPAC actualizadas

Paloma Arranz Mascaró
Ana Domínguez Vidal
Celeste García Gallarín
M^a Dolores López de la Torre
Ana Africa Márquez López
Francisco Partal Ureña
M^a Luisa Quijano López

Fecha: 2018

ASIGNATURA:

Química

Química general I

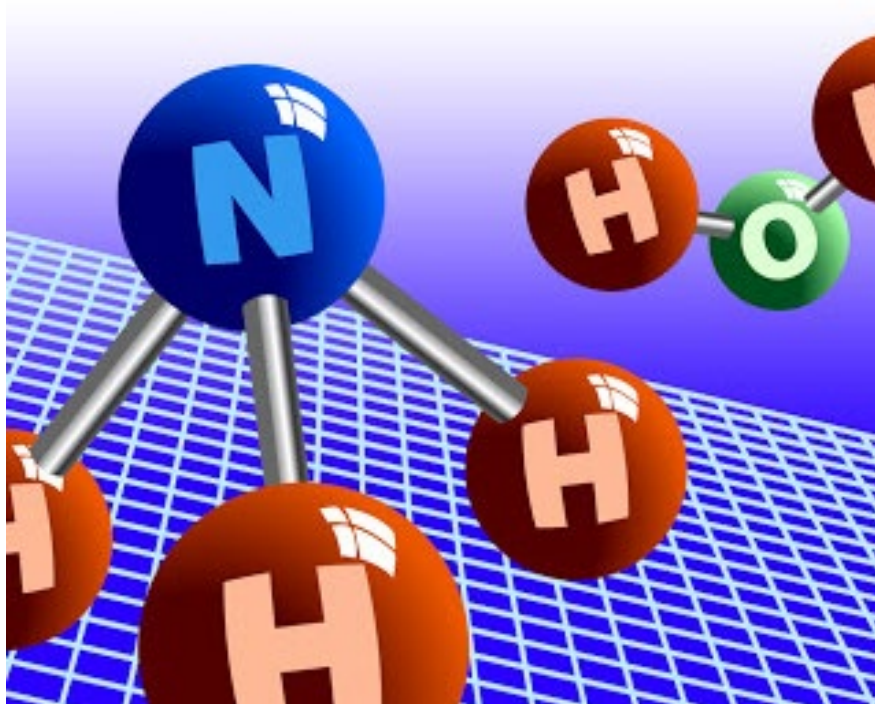
Química general II

Operaciones básicas de laboratorio I

Operaciones básicas de laboratorio II

Otro





NOMENCLATURA DE COMPUESTOS QUÍMICOS

UNIVERSIDAD DE JAÉN.

PID44_201718

NORMAS IUPAC ACTUALIZADAS

Este documento se ha realizado como parte de las actividades desarrolladas en el Proyecto de innovación docente PID44_201718 financiado por la Universidad de Jaén.

El objetivo es contribuir al aprendizaje de nomenclatura y formulación química del alumnado de los primeros cursos de las Titulaciones de Ciencias e Ingeniería.

Autores

P. Arranz Mascarós, Departamento de Química Inorgánica y Orgánica

A. Domínguez Vidal, Departamento de Química Física y Analítica

C. García Gallarín, Departamento de Química Inorgánica y Orgánica

M. D. López de la Torre, Departamento de Química Inorgánica y Orgánica

A. A. Márquez García, Departamento de Química Física y Analítica

F. Partal Ureña, Departamento de Química Física y Analítica

M. L. Quijano López, Departamento de Química Inorgánica y Orgánica



Contenido

INTRODUCCIÓN	5
NOMENCLATURA DE COMPUESTOS INORGÁNICOS	6
GLOSARIO	6
NOMENCLATURA EN QUÍMICA INORGÁNICA	9
TIPOS DE NOMENCLATURAS EN QUÍMICA INORGÁNICA	10
NOMENCLATURA DE LOS IONES	11
COMPUESTOS BINARIOS	12
<i>COMBINACIONES BINARIAS DEL HIDRÓGENO</i>	<i>13</i>
Hidruros con no metales de los grupos 16 y 17 (halógenos)	13
Compuestos del hidrógeno con no metales de los grupos 13, 14 y 15	14
Compuestos del hidrógeno con metales (hidruros metálicos)	15
<i>COMBINACIONES BINARIAS DEL OXÍGENO</i>	<i>15</i>
Óxidos	15
Óxidos dobles	16
Peróxidos, superóxidos y ozónidos	17
<i>OTRAS COMBINACIONES BINARIAS</i>	<i>17</i>
Combinaciones no metal-metal.	17
HIDRÓXIDOS	18
ÁCIDOS INORGÁNICOS Y DERIVADOS	19
PRINCIPIOS GENERALES DE NOMENCLATURA SISTEMÁTICA PARA LOS OXOÁCIDOS	19
<i>ANIONES DERIVADOS DE LOS OXOÁCIDOS.</i>	<i>21</i>
<i>SALES DERIVADAS DE LOS OXOÁCIDOS.</i>	<i>24</i>
<i>DERIVADOS FUNCIONALES DE LOS OXOÁCIDOS.</i>	<i>24</i>
NOMENCLATURA DE COMPUESTOS ORGÁNICOS	27
GLOSARIO	27
NOMENCLATURA EN QUÍMICA ORGÁNICA	29
CLASIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS	30
ALCANOS	31
<i>ALCANOS LINEALES (C_nH_{2n+2})</i>	<i>31</i>
<i>ALCANOS RAMIFICADOS (C_nH_{2n+2})</i>	<i>31</i>
<i>ALCANOS CÍCLICOS</i>	<i>33</i>
ALQUENOS	34
ALQUINOS	36
HIDROCARBUROS AROMÁTICOS	37
DERIVADOS HALOGENADOS (R-X)	38
ALCOHOLES (R-OH).	39
TIOLES (RSH).	40
ÉTERES (R-O-R')	40
TIOÉTERES O SULFUROS (R-S-R')	41
ALDEHÍDOS (R-CHO)	41
CETONAS (R-CO-R')	42
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS (R-COOH).	43
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: SALES (RCOOM).	44
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: ÉSTERES (RCOOR').	44
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: AMIDAS (RCONH ₂).	44
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: ANHÍDRIDOS (R-COOCO-R').	45

SUSTITUYENTES O RADICALES ACILO (R-CO-)	45
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: HALUROS DE ÁCIDO (RCOX)	46
AMINAS (RNH ₂)	46
IMINAS (R-C=NH o R-C=NR')	47
NITRILOS (o CIANUROS) (RCN)	48
NITRODERIVADOS (RNO ₂)	48
COMPUESTOS ORGÁNICOS HETEROFUNCIONALES	48
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS	51
<i>HETEROCICLOS OXIGENADOS</i>	51
<i>HETEROCICLOS NITROGENADOS</i>	51
<i>HETEROCICLOS CON DISTINTOS TIPOS DE HETEROÁTOMOS</i>	51
ESTEREOISÓMEROS	51
<i>ISOMERÍA CIS-TRANS Y CONVECIÓN E/Z</i>	52
<i>CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE COMPUESTOS QUIRALES</i>	53
Reglas CIP	53
Convención R/S	53
Nomenclatura del centro quiral	54
NOMENCLATURA DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN	55
INTRODUCCIÓN	55
GLOSARIO	55
DESCRIPCIÓN DE LA CONSTITUCIÓN DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN	59
<i>NOMBRES DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN</i>	60
<i>FÓRMULAS DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN</i>	63
DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN DE LAS ENTIDADES DE COORDINACIÓN	66
<i>DESCRIPCIÓN DE LA GEOMETRÍA DE COORDINACIÓN</i>	66
<i>DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN. DISTINCIÓN ENTRE DIASTEREISÓMEROS</i>	71
Sistemas con coordinación plano-cuadrada (SP-4)	71
Reglas CIP	71
<i>DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA: DISTINCIÓN ENTRE ENANTIÓMEROS</i>	76
Convenio R/S para centros tetraédricos	77
Convenio C/A para centros octaédricos	77
BIBLIOGRAFÍA	79

INTRODUCCIÓN

Debido al **gran número** de **compuestos químicos** que se conocen, se hace **necesaria una nomenclatura** para poder nombrarlos. Ya durante el período de la Alquimia se desarrolló un gran vocabulario para describir las sustancias químicas, pero los nombres individuales dan poca o ninguna indicación acerca de la composición. El propósito principal de la nomenclatura química es simplemente proveer de una metodología para asignar unos descriptores (nombres y fórmulas) a las sustancias químicas de manera que puedan ser identificadas sin ambigüedad y facilitar la comunicación. Un propósito secundario es conseguir una estandarización que sea aceptada por cualquier científico. Esto no implica que para un compuesto químico exista sólo un nombre, pero sí que el número de nombres aceptables para cualquier compuesto no sea muy elevado.

El sistema de nomenclatura química que toma como base las recomendaciones de la IUPAC es el que se emplea mayoritariamente, tanto en la industria como entre la comunidad científica y académica.

IUPAC, abreviatura en inglés de *International Union of Pure and Applied Chemistry*, Unión Internacional de Química Pura y Aplicada. Fue fundada en 1919. Organismo que vigila la formulación y nomenclatura de los compuestos químicos, entre otras muchas funciones. URL: <https://iupac.org/>

La nomenclatura química debe ser considerada como una lengua, que consiste en palabras que obedecen unas reglas de sintaxis. En el lenguaje de la nomenclatura química, los nombres de los átomos se consideran las palabras, las cuales se unen para formar los nombres de los compuestos químicos. La sintaxis es el conjunto de reglas gramaticales para construir palabras. En nomenclatura química, la sintaxis incluye el uso de símbolos (tales como puntos, comas y guiones), el uso de números y el orden de citado de varias palabras, sílabas y símbolos.

Generalmente, se requiere una raíz sobre la cual construir el nombre. El nombre de un compuesto químico se construye añadiendo otras unidades a esta raíz, como pueden ser sufijos, prefijos o infijos. Los prefijos indican, por ejemplo, sustituyentes, número de ellos, tipos estructurales, etc. Los sufijos son de diferentes tipos e indican información específica sobre el compuesto, como puede ser la naturaleza del mismo, la carga que poseen, etc.

Dividiremos este texto en tres partes: **Nomenclatura de compuestos inorgánicos**, **Nomenclatura de compuestos orgánicos** y **Nomenclatura de compuestos de coordinación**.

Sugerimos, al inicio de cada parte, un glosario de términos que el estudiante deberá conocer antes de empezar a formular y finalizamos con un capítulo de bibliografía.

NOMENCLATURA DE COMPUESTOS INORGÁNICOS

GLOSARIO

Átomo. Es la unidad constituyente más pequeña de la materia que tiene las propiedades de un elemento químico.

Molécula. Es la parte más pequeña de una sustancia química que puede existir de forma independiente con sus propiedades características. Según el número de átomos que constituye la molécula, éstas pueden ser: diatómicas (dos átomos), triatómicas (tres átomos), tetraatómicas (cuatro átomos)...

Elemento químico. Una sustancia química pura compuesta que está formada por el mismo tipo de átomos y no se puede descomponer en otras más simples por medios químicos. Se representa mediante símbolos.

Símbolo químico. Los símbolos químicos son abreviaciones o signos que se utilizan para identificar los elementos.

Compuesto químico. Se trata de una sustancia formada por la combinación de uno, dos o más elementos en proporciones fijas. Se representa mediante fórmulas.

Fórmula. Combinación de símbolos químicos que expresa la composición de una sustancia.

Fórmula empírica. Fórmula que nos da la relación numérica más sencilla entre los átomos que componen la molécula. Ejemplo, CH₃: etano (tres átomos de hidrógeno por cada átomo de carbono).

Fórmula molecular. Es la fórmula química que da el número total de átomos de cada elemento en una molécula de un compuesto. Ejemplo, C₂H₆: etano.

Fórmula estructural. La fórmula estructural de un compuesto químico es una representación gráfica de la estructura molecular- que muestra cómo se organizan los átomos en el espacio.¹ Ejemplo:



Iones. Especies cargadas, procedentes de átomos o grupos de átomos que han ganado o perdido electrones.

Anión. Ion con carga negativa.

Catión. Ion con carga positiva.

¹ En el capítulo dedicado a Nomenclatura en Química Orgánica se ampliarán y ejemplificarán con más detalle los distintos tipos de fórmulas estructurales que se pueden emplear.

Valencia. El número máximo de átomos univalentes (originalmente átomos de hidrógeno o cloro) que puede combinar con un átomo del elemento considerado o con un fragmento del mismo o por lo que un átomo de este elemento pueda ser sustituido.

Estado de oxidación (también llamado **número de oxidación** o **grado de oxidación**). Es un indicador del grado de oxidación (pérdida o ganancia de electrones) de un átomo en un compuesto u otra especie química. Formalmente, el estado de oxidación, que puede ser positivo, negativo o cero, es la carga hipotética que un átomo tendría si todos sus enlaces con diferentes elementos fueran 100% iónicos, sin componente de enlace covalente. Se escriben con números arábigos precedidos de su signo por ejemplo, +1, +2, +8/3, 0, -1, -2, -3... Estos estados de oxidación son una herramienta fundamental para formular y deben ser memorizados. Los más comunes vienen reflejados en la Tabla 1.

Tabla 1. Estados de oxidación más comunes.

Grupo / Elemento	Estados de oxidación	Grupo / Elemento	Estados de oxidación
1 / H Li, Na, K, Rb, Cs, Fr	+1 / -1 +1	11 / Cu Ag Au	+1, +2 +1 +1, +3
2 / Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra	+2	12 / Zn, Cd Hg	+2 +1, +2
3 / Sc, Y	+3	13 / B Al, Ga In, Tl	+3 / -3 +3 +1, +3
4 / Ti, Zr Hf	+2, +3, +4 +3, +4	14 / C, Si Ge, Sn, Pb	+4 / -4 +2, +4
5 / V Nb, Ta	+2, +3, +4, +5 +3, +4, +5	15 / N P As, Sb Bi	+1 a +5 / -3 +1, +3, +5 / -3 +3, +5 / -3 +3, +5
6 / Cr, Mo, W	+2, +3, +4, +5, +6	16 / O S, Se, Te Po	-2 / -1 +2, +4, +6 / -2 +2, +4
7 / Mn Tc, Re	+2 a +7 +4, +5, +6, +7	17 / F Cl, Br, I, At	-1 +1, +3, +5, +7 / -1
8 / Fe Ru, Os	+2, +3 +2 a +8	Lantánidos / La, Pm, Gd, Ho, Er, Lu Ce, Pr, Tb, Dy Sm, Eu, Tm, Yb Nd	+3 +3, +4 +2, +3 +2, +3, +4
9 / Co Rh, Ir	+2, +3 +3, +4, +6	Actínidos / Ac, Cf, Es, Fm, Md Th, Cm, Bk Pa U, Np, Pu, Am	+3 +3, +4 +3, +4, +5 +3, +4, +5, +6
10 / Ni Pd Pt	+2, +3 +2, +4 +2, +4, +6		

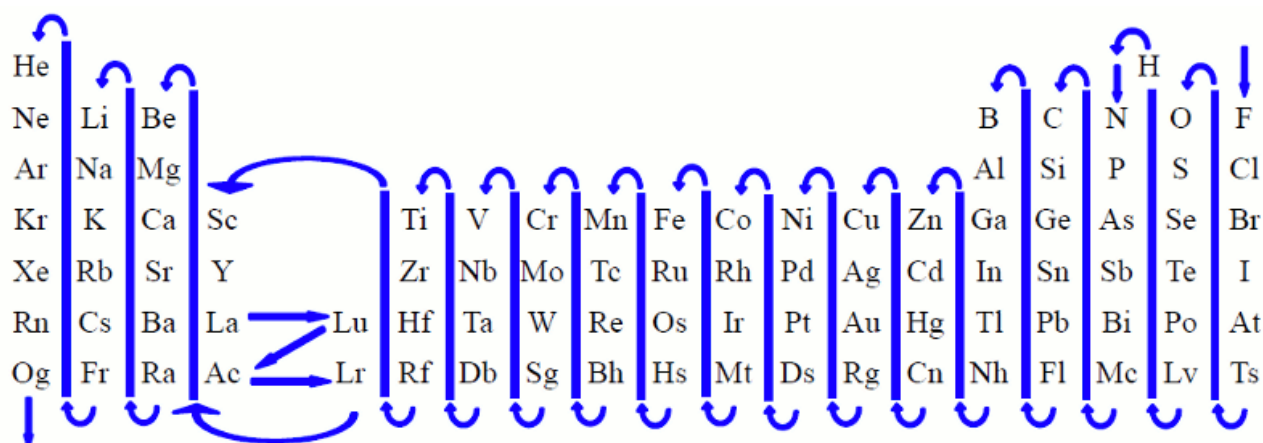


Figura 2. Secuencia de los elementos para formular y nombrar compuestos químicos.

La secuencia de los elementos (Figura 2) se puede obtener a partir de la tabla periódica, trasladando el hidrógeno entre los grupos 15 y 16 y sobre ellos. Además, hay que desplazar el grupo de los gases nobles (grupo 18) para colocarlo delante del grupo 1. Por último, hay que recordar que detrás del itrio ($Z = 39$) aparecen las series de los lantánidos y la de los actínidos una a continuación de la otra. La consecuencia, por ejemplo, es que en los nombres de los compuestos de los halógenos con el oxígeno, no son óxidos de los halógenos, sino halogenuros de oxígeno.

TIPOS DE NOMENCLATURAS EN QUÍMICA INORGÁNICA

La adopción de una nomenclatura química consensuada es una herramienta clave para la comunicación efectiva en ciencias químicas. La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, en sus siglas inglesas) ofrece recomendaciones sobre la naturaleza y el uso de la nomenclatura química. Todos los detalles se pueden hallar en el libro *Nomenclature of Inorganic Chemistry* coloquialmente conocido como el *Libro Rojo*. La IUPAC recomienda el uso de la **nomenclatura sistemática**, la cual se basa en nombrar los compuestos usando prefijos numéricos griegos que indican el número de átomos de un mismo elemento en una molécula. Se obtiene por aplicación de las reglas sistemáticas de nomenclatura química y a partir de la cual se puede deducir, al menos, su composición química. Ésta se subdivide en tres tipos:

1) La nomenclatura de composición, también llamada **nomenclatura estequiométrica o binaria**. Está basada en la composición y no en la estructura. En ella se indica la proporción de los constituyentes a partir de la fórmula empírica o la molecular. A veces, puede ser la única opción si no se dispone de (o no se pretende dar) información estructural. La proporción de los elementos o constituyentes puede indicarse de varias formas:

- Usando prefijos multiplicadores (mono-, di-, tri-, etc.).
- Usando el número de oxidación de los elementos (mediante números romanos).
- Usando el número de carga de los iones (números arábigos seguido del signo correspondiente).

Ejemplos: O_3 , trioxígeno; PCl_3 , tricloruro de fósforo; $NaCl$, cloruro de sodio

2) La nomenclatura de adición. Considera que un compuesto o especie es una combinación de un átomo central o átomos centrales con otros elementos o grupos (denominados ligandos) que se unen a él (ellos). En la nomenclatura de adición los nombres se construyen colocando los nombres de los ligandos como prefijos del/de los nombre/s del/de los átomo/s central/es.

Esta nomenclatura es útil para nombrar los oxocompuestos y los compuestos de coordinación.

Ejemplos: PCl_3 , triclorurofósforo; $\text{HMnO}_4 = [\text{MnO}_3(\text{OH})]$, hidroxidotrioxidomanganeso

3) La nomenclatura de sustitución. Está basada en los hidruros no metálicos, nombrados como los hidrocarburos y empleando los sufijos necesarios. Se utiliza ampliamente en los compuestos orgánicos y se basa en la idea de un hidruro progenitor que se modifica al sustituir los átomos de hidrógeno por otros átomos y/o grupos. Los nombres se forman citando los prefijos o sufijos pertinentes de los grupos sustituyentes que reemplazan los átomos de hidrógeno del hidruro progenitor, unidos, sin separación, al nombre del hidruro padre sin sustituir.

Ejemplos: SiH_4 , silano; SiHCl_3 , triclorosilano

La IUPAC también permite el nombrar ciertos compuestos siguiendo la denominada **nomenclatura tradicional**, debido a que su uso está muy extendido. Consiste en un nombre, que identifica a una sustancia química, pero que no ha sido obtenido por aplicación de las reglas sistemáticas de la nomenclatura.

NOMENCLATURA DE LOS IONES

Los iones se nombran añadiendo los números de carga entre paréntesis, *p. ej.*, (1+), (3+), (2-) al nombre del elemento si son cationes o al nombre del elemento modificado si son aniones. En las fórmulas la carga va como superíndice y el número precede al signo (con el formato n+/n-).

Para obtener (la mayoría de) los nombres de los aniones monoatómicos se añade la terminación '-uro' en lugar de las terminaciones de los nombres de los elementos: '-eso', '-ico', '-o', '-io', '-ogeno', '-ono', u '-oro'. La excepción más importante es el oxígeno, para el que el nombre del anión más simple (O^{2-}) es óxido. Para algunos elementos se usa la raíz del nombre en latín antepuesta a la terminación '-uro'. Existen aniones que pueden tener nombres tradicionales aceptados por la IUPAC, debido a su amplio uso, los cuales se usan sin números de carga.

Ejemplos de algunos iones vienen recogidos en la siguiente tabla²,

Tabla 2. Ejemplos de iones comunes

Fórmula	Nombre Sistemático	Nombre no sistemático	Fórmula	Nombre sistemático	Nombre no sistemático
H^+	Hidrógeno(1+) Hidrógeno	Protón	Cl^-	Cloruro(1-)	Cloruro
$^1H^+$	Protio(1+) Protón		I_3^-	Triyoduro(1-)	Triyoduro
$^2H^+=D^+$	Deuterio(1+) Deuterón		O^{2-}	Óxido(2-)	Óxido
$^3H^+=T^+$	Tritio(1+) Tritón		O_2^{2-}	Dióxido(2-)	Peróxido
Na^+	Sodio(1+)		O_2^-	Dióxido(1-)	Superóxido
Fe^{2+}	Hierro(2+)		O_3^-	Trióxido(3-)	Ozónido
Hg_2^{2+}	Dimercurio(2+)		C_2^{2-}	Dicarburo(2-)	Acetiluro
Cu^{2+}	Cobre(2+)		N_3^-	Trinitruro(1-)	Azida
Cu^+	Cobre(1+)		P^{3-}	Fosfuro(3-)	Fosfuro
Mn^{2+}	Manganeso(2+)		S^{2-}	Sulfuro(2-)	Sulfuro
Cr^{3+}	Cromo(3+)		S_2^{2-}	Disulfuro(2-)	Disulfuro
H_3O^+	Oxidanio	Oxonio Hidronio	OH^-	Oxidano Hidrurooxigenato(1-)	Hidróxido
NH_4^+	Azanio	Amonio	SO_3^{2-}	Trióxidosulfato(2-)	Sulfito
			SO_4^{2-}	Tetraóxidosulfato(2-)	Sulfato
			PO_4^{3-}	Tetraóxidofosfato(3-)	Fosfato

COMPUESTOS BINARIOS

Los compuestos binarios son sustancias puras que están formados por dos elementos químicos. Para nombrarlos se utiliza el nombre estequiométrico que consiste en clasificar a uno de los elementos como el constituyente electropositivo, y el otro como electronegativo. El constituyente electropositivo es, por convenio, el elemento que aparece en último lugar en la secuencia de la tabla (Figura 2), y su nombre es el propio del elemento sin modificar (sodio, roentgenio, prometio, silicio, rubidio,...). El nombre del constituyente electronegativo se construye modificando el nombre del elemento con la terminación “uro”. El nombre se forma combinado el nombre constituyente negativo que se cita primero, con el del constituyente electropositivo, ambos debidamente calificados con los prefijos multiplicadores adecuados (“mono”, “di”, “tri”, “tetra”, etc. Los prefijos multiplicadores preceden a los nombres que

² Se pueden encontrar más ejemplos en las secciones IR-5.3.2 e IR-5.3.3 del libro *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book).

afectan y se unen sin espacios ni guiones, las vocales de los prefijos no deben elidirse (aunque una excepción permitida es “monóxido” en lugar de “monoóxido”). Las partes de los nombres se separan por la preposición “de”.

COMBINACIONES BINARIAS DEL HIDRÓGENO

Los compuestos derivados de la combinación del hidrógeno con los restantes elementos son muy dispares, debido a la peculiaridad del hidrógeno (puede tanto ceder su único electrón con facilidad como captarlo de otro átomo). Esto hace que en sus combinaciones binarias unas veces sea el elemento más electropositivo y otras el más electronegativo, dependiendo del elemento con el cual forme el compuesto.

Hidruros con no metales de los grupos 16 y 17 (halógenos)

En las combinaciones del hidrógeno con los no metales F, Cl, Br, I, At, S, Se y Te el hidrógeno presenta el número de oxidación +1 y los otros elementos -1 (grupo 17) ó -2 (grupo 16). En la nomenclatura tradicional se les denominaba a estos compuestos ácidos hidrácidos, ya que su disolución acuosa presenta carácter ácido. Al ser esta característica una propiedad de las disoluciones acuosas, la nomenclatura tradicional se considera actualmente incorrecta. La forma de escribirlos y nombrarlos sería:

Tabla 3. Ejemplos de hidruros con no metales de los grupos 16 y 17.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático sustitutivo	Nombre sistemático aditivo	Nomenclatura tradicional (incorrecta)
HF	Fluoruro de hidrógeno	Fluorano	Fluorurohidrógeno	Ácido fluorhídrico
HCl	Cloruro de hidrógeno	Clorano	Clorurohidrógeno	Ácido clorhídrico
HBr	Bromuro de hidrógeno	Bromano	Bromurohidrógeno	Ácido bromhídrico
HI	Ioduro de hidrógeno	Yodano	Yodurohidrógeno	Ácido iodhídrico
H ₂ S	Sulfuro de hidrógeno / Sulfuro de dihidrógeno	Sulfano	Dihidrurosulfuro	Ácido sulfhídrico
H ₂ Se	Selenuro de hidrógeno / Selenuro de dihidrógeno	Selano	Dihidruroselenio	Ácido selenhídrico
H ₂ Te	Telururo de hidrógeno / Telururo de dihidrógeno	Telano	Dihidruroteluro	Ácido telurhídrico

Como se observa, a la hora de formularlos, el número de oxidación del hidrógeno se pone como subíndice al no metal (en este caso, al ser uno no se indica en la fórmula) y el número de oxidación del no metal se pone como subíndice al hidrógeno. Esto se cumple para todos los compuestos binarios. El subíndice que nos indica el número de átomos que forma cada compuesto tiene que venir en consonancia con los números de oxidación de los elementos que lo forma: los números de oxidación siempre deben sumar cero para sustancias neutras, la carga negativa total en caso de aniones y la carga positiva total en caso de cationes. Esto es así en todo compuesto y no sólo en los binarios.

Compuestos del hidrógeno con no metales de los grupos 13, 14 y 15

A diferencia de los hidruros anteriores donde era el hidrógeno el elemento más electropositivo, aquí es el más electronegativo, y presenta número de oxidación -1. De ahí que digamos *trihidruro de fósforo* y no *fosfuro de hidrógeno*.

Tabla 4. Ejemplos de compuestos del hidrógeno con no metales de los grupos 13, 14 y 15.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático sustitutivo	Nombre sistemático aditivo	Nombre tradicional
PH ₃	Trihidruro de fósforo	Fosfano	Trihidrurofósforo	Fosfina
AsH ₃	Trihidruro de arsénico	Arsano	Trihidruroarsénico	Arsina
SbH ₃	Trihidruro de antimonio	Estibano	Trihidruroantimonio	Estibina
SiH ₄	Tetrahidruro de silicio	Silano	Tetrahidrurosilicio	Silano
BH ₃	Trihidruro de boro	Borano	Trihidruroboro	Borano
NH ₃	*	Azano	Trihidruronitrógeno	Amoniaco
CH ₄	*	Metano	Tetrahidrurocarbono	Metano
GeH ₄	*	Germano	Tetrahidrurogermanio	

* Aunque sería posible generar un nombre sistemático binario para estos compuestos, la IUPAC no lo contempla.

Compuestos del hidrógeno con metales (hidruros metálicos)

En la combinación del hidrógeno con los metales éste presenta número de oxidación -1, siendo el elemento más electronegativo.

Tabla 5. Ejemplos de compuestos del hidrógeno con metales.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático sustitutivo	Nombre sistemático aditivo	Nombre tradicional
LiH	Hidruro de litio	-	Hidrurolitio	Hidruro de litio
BeH ₂	Hidruro de berilio / Dihidruro de berilio	-	Dihidruoberilio	Hidruro de berilio
AlH ₃	Hidruro de aluminio / Trihidruro de aluminio	Alumano	Trihidruroaluminio	Hidruro de aluminio
GaH ₃	Hidruro de galio / Trihidruro de galio	Galano	Trihidrurogalio	Hidruro de galio
InH ₃	Hidruro de indio / Trihidruro de indio	Indigano	Trihidruroindio	Hidruro de indio
TlH ₃	Hidruro de talio / Trihidruro de talio	Talano	Trihidrurotalio	Hidruro de talio
SnH ₄	Hidruro de estaño / Tetrahidruro de estaño	Estannano	Tetrahidruroestaño	Hidruro de estaño
PbH ₄	Hidruro de plomo / Tetrahidruro de plomo	Plumbano	Tetrahidruroplomo	Hidruro de plomo
BiH ₃	Hidruro de bismuto / Trihidruro de bismuto	Bismutano	Trihidrurobismuto	Hidruro de bismuto

COMBINACIONES BINARIAS DEL OXÍGENO

Óxidos

En los óxidos el oxígeno presenta número de oxidación -2, salvo en compuestos con flúor y cloro, en los cuales presenta número de oxidación +2. La IUPAC aconseja adoptar la nomenclatura sistemática binaria o estequiometría para las combinaciones binarias y para los hidróxidos. El prefijo mono se puede omitir si solo se conoce un óxido del elemento considerado.

La IUPAC permite nombres sistemáticos alternativos para los óxidos metálicos, en los cuales el número de oxidación del metal se indica entre paréntesis mediante números romanos.

Por otro lado, la IUPAC está en contra de la nomenclatura -oso/-ico, utilizada en la

nomenclatura tradicional, para indicar que un metal que posea solo dos posibles estados de oxidación actúa o bien con el inferior (-oso) o con el superior (-ico).

Tabla 6. Ejemplos de óxidos.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático alternativo
Li_2O	Óxido de litio	Óxido de litio
Na_2O	Óxido de sodio	Óxido de sodio
BeO	Óxido de berilio	Óxido de berilio
CaO	Óxido de calcio	Óxido de calcio
FeO	Óxido de hierro	Óxido de hierro(II)
Fe_2O_3	Trióxido de dihierro	Óxido de hierro(III)
MnO_2	Dióxido de manganeso	Óxido de manganeso(IV)
Mn_2O_3	Trióxido de dimanganeso	Óxido de manganeso(III)
N_2O	Óxido de dinitrógeno	-
NO	Óxido de nitrógeno Monóxido de nitrógeno	-
OCl_2	Dicloruro de oxígeno	-

Una mención especial merece el agua, para la cual se aceptan más nombres correctos:

Tabla 7. Nombres admitidos para el agua.

	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático sustitutivo	Nombre sistemático aditivo	Nombre tradicional
H_2O	Óxido de hidrógeno	Oxidano	Dihidrurooxígeno	Agua

Óxidos dobles

Existen en la naturaleza algunos óxidos en los que el metal aparenta presentar un estado de oxidación anómalo. Determinaciones estructurales experimentales de la red cristalina han determinado que está formada por dos óxidos en los cuales el metal presenta dos estados de oxidación. Algunos ejemplos son:

Tabla 8. Ejemplos de óxidos dobles.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre sistemático alternativo
$\text{Fe}_3\text{O}_4 = \text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	Tetraóxido de trihierro	Tetraóxido de hierro(II,III)
$\text{Pb}_3\text{O}_4 = 2\text{PbO} \cdot \text{PbO}_2$	Tetraóxido de triplomo	Tetraóxido de plomo(II,IV)
$\text{Mn}_3\text{O}_4 = \text{MnO} \cdot \text{Mn}_2\text{O}_3$	Tetraóxido de trimanganeso	Tetraóxido de manganeso(II,III)
$\text{Pt}_3\text{O}_4 = 2\text{PtO} \cdot \text{PtO}_2$	Tetraóxido de triplatino	Tetraóxido de platino(II,IV)

Peróxidos, superóxidos y ozónidos

Son compuestos donde intervienen los aniones peróxido (O_2^{2-}), superóxido (O_2^-) u ozónido (O_3^-) con un elemento electropositivo. En el nombre sistemático binario, la carga del anión se añade entre paréntesis, para así indicar la presencia del anión en el compuesto.

Tabla 9. Ejemplos de peróxidos, superóxidos y ozónidos.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Nombre tradicional
Li_2O_2	Dióxido(2-) de dilitio	Peróxido de litio
Na_2O_2	Dióxido(2-) de disodio	Peróxido de sodio
BeO_2	Dióxido(2-) de berilio	Peróxido de berilio
KO_2	Dióxido(1-) de potasio	Superóxido de potasio
NaO_2	Dióxido(1-) de sodio	Superóxido de sodio
BaO_4	Tetraóxido(1-) de bario	Superóxido de bario
KO_3	Trióxido(1-) de potasio	Ozónido de potasio
CsO_3	Trióxido(1-) de cesio	Ozónido de cesio

OTRAS COMBINACIONES BINARIAS

Combinaciones no metal-metal.

En estas combinaciones (denominadas sales binarias) el elemento más electropositivo es el metal y se escribe a la izquierda al formularlo. El no metal es el elemento más electronegativo y el que da nombre al compuesto, terminando su nombre en *-uro*. El no metal presentará el número de oxidación negativo.

Tabla 10. Ejemplos de combinaciones no metal-metal.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Otros nombres sistemáticos alternativos
CaF_2	Difluoruro de calcio	Fluoruro de calcio
$NaCl$	Cloruro de sodio	Cloruro de sodio
BaF_2	Difluoruro de bario	Fluoruro de bario
$FeCl_2$	Dicloruro de hierro	Cloruro de hierro(II) Cloruro de hierro(2+)
$HgCl_2$	Dicloruro de mercurio	Cloruro de mercurio(II) Cloruro de mercurio(2+)
Hg_2Cl_2	Dicloruro de dimercurio	Cloruro de (dimercurio) Cloruro de dimercurio(2+) (se indica la presencia del catión dimercurio en el compuesto)
Na_2S	Sulfuro de disodio	Sulfuro de sodio

Na_2S_2	Disulfuro de disodio	(Disulfuro) de disodio Disulfuro(2-) de sodio (se indica la presencia del anión disulfuro en el compuesto)
MnS	(Mono)sulfuro de manganeso	Sulfuro de manganeso(II) Sulfuro de manganeso(2+)
MnS_2	Disulfuro de manganeso	Sulfuro de manganeso(IV) Sulfuro de manganeso(4+)

Combinaciones no metal-no metal

Estas combinaciones se nombran de forma similar a las anteriores. Se debe seguir la misma jerarquía vista hasta ahora.

Tabla 11. Ejemplos de combinaciones no metal-no metal.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Compuesto	Nombre sistemático binario
BrF	Fluoruro de bromo	BrF_7	Heptafluoruro de bromo
BrF_3	Trifluoruro de bromo	PF_5	Pentafluoruro de fósforo
BrF_5	Pentafluoruro de bromo	Si_3N_4	Tetranitruro de trisilicio

HIDRÓXIDOS

Los hidróxidos son compuestos ternarios en los cuales un metal aparece combinado con el ion hidróxido (OH^-). La forma de nombrarlos es la siguiente:

Tabla 12. Ejemplos de hidróxidos.

Compuesto	Nombre sistemático binario	Otros nombres sistemáticos alternativos
NaOH	Hidróxido de Sodio	Hidróxido de sodio
$\text{Ca}(\text{OH})_2$	Dihidróxido de calcio	Hidróxido de calcio
$\text{Fe}(\text{OH})_2$	Dihidróxido de hierro	Hidróxido de hierro(II) Hidróxido de hierro(2+)
$\text{Fe}(\text{OH})_3$	Trihidróxido de hierro	Hidróxido de hierro(III) Hidróxido de hierro(3+)

ÁCIDOS INORGÁNICOS Y DERIVADOS

Ciertos compuestos sencillos inorgánicos y otros que contienen carbono tienen nombres no sistemáticos que contiene la palabra *ácido*. Estos nombres son únicos en la nomenclatura moderna, en el sentido de que describen una propiedad química particular del compuesto en cuestión. Ejemplos de estos nombres son ácido fosfórico, ácido difosfórico, ácido ortobórico, ácido metabórico, etc. A todos estos ácidos se les puede dar nombres sistemáticos usando los principios ya vistos anteriormente.

PRINCIPIOS GENERALES DE NOMENCLATURA SISTEMÁTICA PARA LOS OXOÁCIDOS

Los ácidos inorgánicos (denominados *oxoácidos*) presentan la fórmula general $H_a X_b O_c$, en donde X representa generalmente un no metal o un metal de transición que se encuentra en un estado de oxidación muy elevado. Para algunos oxoácidos la fórmula general, dependiendo del número de oxidación que presente el elemento central, es:

$H X O_{\frac{n+1}{2}}$ Para elementos con número de oxidación impar; n es el número de oxidación.

$H_2 X O_{\frac{n+2}{2}}$ Para elementos con número de oxidación par; n es el número de oxidación.

Para nombrarlos siguiendo la **nomenclatura tradicional** se utilizan unos sufijos y prefijos específicos y el nombre comienza por la palabra *ácido*. En general, si el elemento central posee cuatro estados de oxidación posibles para formar este tipo de compuestos, éstos serían:

Tabla 13. Prefijos y sufijos para oxoácidos.

Prefijo	Sufijo	Estado de oxidación
Hipo-	-oso	El más bajo
	-oso	Intermedio más bajo
	-ico	Intermedio más alto
Per-	-ico	El más alto

Si el elemento central tiene sólo tres estados de oxidación, este elemento no podría formar el oxoácido de prefijo *Per-* y si tiene dos, además, no podría formar el oxoácido de prefijo *Hipo-*.

Algunos ejemplos son:

$HClO \rightarrow$ Ácido hipocloroso

$H_2SO_4 \rightarrow$ Ácido sulfúrico

Existen otros **oxoácidos que no cumplen con la fórmula general** vista anteriormente. En estos casos, la fórmula del ácido en cuestión debe aprenderse de memoria. Algunos ejemplos de estos ácidos son:

Tabla 14. Ejemplos de oxoácidos que no cumplen con la fórmula general.

Compuesto	Nomenclatura tradicional
H_3PO_3	Ácido fosforoso
H_3PO_4	Ácido fosfórico
H_3AsO_3	Ácido arsenoso
H_3AsO_4	Ácido arsénico
H_3BO_3	Ácido bórico
H_4SiO_4	Ácido silícico
$\text{H}_6\text{Si}_2\text{O}_7$	Ácido disilícico

Una nomenclatura alternativa para nombrar estos compuestos es la **nomenclatura de hidrógeno**. Esta nomenclatura es muy útil cuando la unión de los hidrógenos en la estructura molecular no está especificada o es desconocida. Para los ejemplos, anteriormente vistos, los nombres serían:

$\text{HClO} \rightarrow \text{Hidrogeno(monoxidoclorato)}$

$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{Dihidrogeno(tetraoxidosulfato)}$

Esta nomenclatura presenta cierta ambigüedad para ciertos compuestos derivados de los oxoácidos, en hidruros y en sales. La IUPAC define los nombres hidrógeno para eliminar esta ambigüedad imponiendo los siguientes requerimientos:

1. La palabra *Hidrogeno* (sin tilde) debe estar unido al resto del nombre.
2. El número de hidrógenos debe ser especificado mediante un prefijo multiplicativo.
3. La parte aniónica se debe escribir dentro de paréntesis.
4. La carga de la estructura total (para derivados iónicos) debe ser especificada (esto se verá en secciones posteriores).

Otra nomenclatura aceptada por la IUPAC es la **nomenclatura aditiva**. Esta nomenclatura no es muy utilizada normalmente, aunque tiene una gran relación con la estructura molecular que presenta los compuestos y es muy útil a la hora de determinar los iones que se forman cuando estudiamos un equilibrio ácido-base. Para algunos casos anteriores, los nombres en nomenclatura aditiva serían:

$\text{HClO} = [\text{O}(\text{H})\text{Cl}] \rightarrow \text{Hidroxidocloro}$ y $\text{H}_2\text{SO}_4 = [\text{SO}_2(\text{OH})_2] \rightarrow \text{Dihidroxidodioxidoazufre}$

En la Tabla 15 se muestran algunos ejemplos con las nomenclaturas explicadas.

ANIONES DERIVADOS DE LOS OXOÁCIDOS.

Los aniones derivados de un oxoácido determinado se obtienen mediante la pérdida sucesiva de cationes H^+ . Existirán, por tanto, tantos aniones derivados como cationes hidrógeno puedan ser retirados.

Para estos aniones derivados puede utilizarse las mismas reglas de nomenclatura que las vistas para los oxoácidos. Hay, en la nomenclatura tradicional, un cambio en el sufijo de estos aniones dependiendo del estado de oxidación del átomo central del oxoácido. Así, deben tenerse en cuenta los cambios:

-oso	-ito
-ico	-ato

Si utilizamos nomenclatura sistemática, el anión siempre adquiere el sufijo –ato en todos los casos. En la Tabla 16 se recogen ejemplos de este apartado.³

³ Muchos más ejemplos de cómo nombrar distintos oxoácidos y sus aniones y cationes derivados vienen recogidos en la tabla IR-8.1 (páginas 127-132) y en la sección IR-8.5 (página 137) del libro *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book).

Tabla 15. Nomenclatura de oxoácidos:

Compuesto	Nomenclatura tradicional	Nomenclatura hidrógeno	Nomenclatura aditiva
HClO ₂	Ácido cloroso	Hidrogeno(dioxidoclorato)	[ClO(OH)] → Hidroxidooxidocloro
HClO ₃	Ácido clórico	Hidrogeno(trioxidoclorato)	[ClO ₂ (OH)] → Hidroxidodioxidocloro
HClO ₄	Ácido perclórico	Hidrogeno(tetraoxidoclorato)	[ClO ₃ (OH)] → Hidroxidotrioxidocloro
H ₂ SO ₂	Ácido hiposulfuroso Sulfanodiol	Dihidrogeno(dioxidosulfato)	[S(OH) ₂] → Dihidroxidoazufre
H ₂ SO ₃	Ácido sulfuroso	Dihidrogeno(trioxidosulfato)	[SO(OH) ₂] → Dihidroxidooxidoazufre
HNO ₂	Ácido nitroso	Hidrogeno(dioxidonitrato)	[NO(OH)] → Hidroxidooxidonitrógeno
HNO ₃	Ácido nítrico	Hidrogeno(trioxidonitrato)	[NO ₂ (OH)] → Hidroxidodioxidonitrógeno
H ₂ Cr ₂ O ₇	Ácido dicrómico	Dihidrogeno(heptaoxidodicromato)	
HMnO ₄	Ácido permangánico	Hidrogeno(tetraoxidomanganato)	
H ₂ MnO ₄	Ácido mangánico	Dihidrogeno(tetraoxidomanganato)	
H ₃ PO ₃	Ácido fosforoso	Trihidrogeno(trioxidofosfato)	[P(OH) ₃] → Trihidroxidofósforo
H ₃ PO ₄	Ácido fosfórico	Trihidrogeno(tetraoxidofosfato)	[PO(HO) ₃] → Trihidroxidooxidofósforo
	La nomenclatura para el Cl se aplica al Br, I y At. La nomenclatura para el S se aplica al Se, Te y Po.		

Tabla 16. Nomenclatura de aniones de oxoácidos.

Compuesto ^a	Nombre tradicional	Nombre sistemático aditivo	Nombre de hidrógeno
$[\text{NO}_3]^-$	Nitrato	Trioxidonitrato(1-)	
$[\text{NO}_2]^-$	Nitrito	Dioxidonitrato(1-)	
HCO_3^-	Hidrogenocarbonato/ Bicarbonato ^b	Hidroxidodioxidocarbonato(1-)	Hidrogeno(trioxidocarbonato)(1-)
$[\text{CO}_3]^{2-}$	Carbonato	Trioxidocarbonato(2-)	
H_2PO_4^-	Dihidrógenofosfato	Dihidroxidodioxidofosfato(1-)	Dihidrogeno(tetraoxidofosfato)(1-)
HPO_4^{2-}	Hidrógenofosfato	Hidroxidotrioxidofosfato(2-)	Hidrogeno(tetraoxidofosfato)(2-)
$[\text{PO}_4]^{3-}$	Fosfato	Tetraoxidofosfato(3-)	
H_2PO_3^-	Dihidrógenofosfito	Dihidroxidooxidofosfato(1-)	Dihidrogeno(trioxidofosfato)(1-)
HPO_3^{2-}	Hidrógenofosfito	Hidroxidodioxidofosfato(2-)	Hidrogeno(trioxidofosfato)(2-)
$[\text{PO}_3]^{3-}$	Fosfito	Trioxidofosfato(3-)	
HSO_4^-	Hidrogenosulfato/ Bisulfato ^b	Hidroxidotrioxidosulfato(1-)	Hidrogeno(tetraoxidosulfato)(1-)
$[\text{SO}_4]^{2-}$	Sulfato	Tetraoxidosulfato(2-)	

^a Se utilizan corchetes para indicar que la carga no está localizada en una parte concreta de la estructura.

^b Cuando un oxoácido presenta dos hidrógenos en su estructura y su anión derivado conserva uno de ellos, esto se indicaba en la nomenclatura tradicional con el prefijo *bi*-. Aunque **se considera incorrecto**, todavía es utilizado en muchos casos.

SALES DERIVADAS DE LOS OXOÁCIDOS

Al igual que las sales binarias, las sales derivadas de los oxoácidos se obtienen cuando un anión derivado de un oxoácido se une a un catión. Como subíndice del anión estará la carga del catión, y como subíndice del catión la carga del anión. Algunos ejemplos son:

Tabla 17. Ejemplos de sales derivadas de oxoácidos

Compuesto	Nombres aceptados
NaNO_3	Nitrato de sodio Trioxidonitrato de sodio
NaHCO_3	Hidrogenocarbonato de sodio Hidrogeno(trioxidocarbonato) de sodio Hidroxidodioxidocarbonato de sodio
$\text{Ca(NO}_3)_2$	Nitrato de calcio Bis(trioxidonitrato) de calcio
$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	Fosfato de calcio Bis(tetraoxidofosfato) de tricalcio
$\text{Ca(HPO}_4)_2$	Hidrogenofosfato de calcio Hidrogeno(tetraoxidofosfato) de calcio Hidroxidotrioxidofosfato de calcio

DERIVADOS FUNCIONALES DE LOS OXOÁCIDOS.

Existen derivados de los oxoácidos en los cuales los grupos $=\text{O}$ y $-\text{OH}$ pueden ser sustituidos por otros grupos. Esta sustitución en el oxoácido padre se indica mediante el uso de infijos o prefijos, recogidos en la siguiente tabla:

Tabla 18. Infijos o prefijos empleados.

Operación de sustitución	Prefijo	Infijo
$\text{OH} \longrightarrow \text{NH}_2$	Amido	Amido
$\text{O} \longrightarrow \text{OO}$	Peroxi	Peroxo
$\text{O} \longrightarrow \text{S}$	Tio	Tio
$\text{O} \longrightarrow \text{Se}$	Seleno	Seleno
$\text{O} \longrightarrow \text{Te}$	Teluro	Teluro
$\text{OH} \longrightarrow \text{F}$	Fluoro	Fluorido
$\text{OH} \longrightarrow \text{Cl}$	Cloro	Clorido
$\text{OH} \longrightarrow \text{Br}$	Bromo	Bromido
$\text{OH} \longrightarrow \text{I}$	Iodo	Iodido
$\text{OH} \longrightarrow \text{CN}$	Ciano	Cianido

Algunos ejemplos vienen recogidos en la siguiente tabla.⁴

Tabla 19. Nomenclatura de derivados funcionales de oxoácidos

Compuesto	Nombre común (tradicional)	Nombre de sustitución	Nombre sistemático
$\text{HNO}_4 = [\text{NO}_2(\text{OOH})]$	Ácido peroxinitrico	Ácido peroxinitrico	(Dioxidanido)dioxidonitrógeno
$\text{NO}_4^- = [\text{NO}_2(\text{OO})]^-$	Peroxinitrato	Peroxinitrato	Dioxidoperoxidonitrato(1-)
$\text{H}_2\text{SO}_5 = [\text{SO}_2(\text{OH})(\text{OOH})]$	Ácido peroxisulfúrico	Ácido sulfuroperoxoico	(Dioxidanio)hydroxidodioxidoazufre
$[\text{SO}_5]^{2-} = [\text{SO}_3(\text{OO})]^{2-}$	Peroxisulfato	Sulfuroperoxoato	Trioxidoperoxidosulfato(2-)
$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3 = [\text{SO}(\text{OH})_2\text{S}]$	Ácido tiosulfúrico	Ácido O-sulfurotiónico	Dihidroxidooxidosulfidoazufre
$\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_3 = [\text{SO}_2(\text{OH})(\text{SH})]$	Ácido tiosulfúrico	Ácido S-sulfurotiónico	Hidroxidodioxidosulfanidoazufre
$\text{S}_2\text{O}_3^{2-} = [\text{SO}_3\text{S}]^{2-}$	Tiosulfato	Sulfurotioato	Trióxidosulfidosulfato(2-)

⁴ Más ejemplos pueden encontrarse en la tabla IR-8.2 (pág. 139-140) del libro *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book).

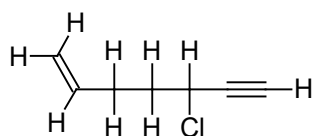
NOMENCLATURA DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

GLOSARIO

Fórmulas estructurales. Representaciones que indican, en mayor o menor detalle, cómo están enlazados entre sí los átomos que constituyen la molécula.

Son las formas de representación más utilizadas en Química Orgánica. Para explicarlas utilizaremos como ejemplo las distintas formas de representación de la estructura de un compuesto cuya fórmula molecular es C_9H_7Cl .

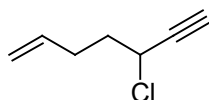
a) **Desarrollada** (o expandida). Se representan todos los átomos por sus símbolos y los enlaces que los unen mediante trazos. No es muy utilizada.



b) **Semidesarrollada** (semiexpandida o semicondensada). Se representan los enlaces carbono-carbono pero no se representan los enlaces carbono-hidrógeno ni carbono-heteroátomo aunque sí se indican el símbolo y su número mediante subíndices.

$CH_2=CH-CH_2-CH_2-CHCl-C\equiv CH$ o también $CH_2=CHCH_2CH_2CHClC\equiv CH$ e incluso $CH_2=CH(CH_2)_3CCH$

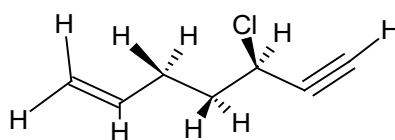
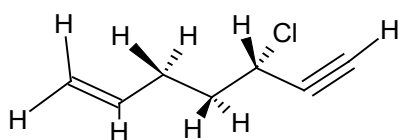
c) **Simplificadas.** Se representan las cadenas carbonadas mediante líneas en zig-zag en las que cada segmento representa un enlace y cada punto de unión un átomo de carbono. No se representan los átomos de hidrógeno unidos a carbono pero sí se representan los heteroátomos y los hidrógenos unidos a ellos (por ejemplo, $-OH$). Los dobles y triples enlaces se representan con dos y tres trazos respectivamente.



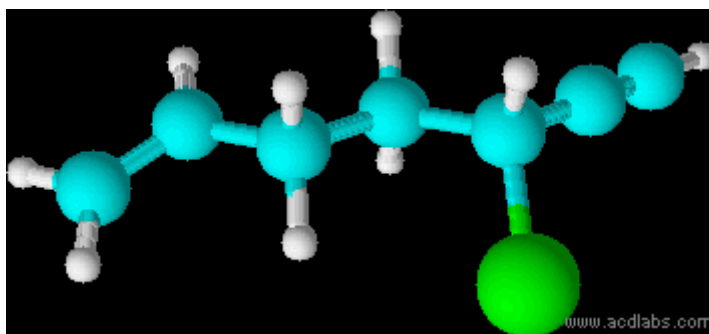
d) **En perspectiva.** Las estructuras de los compuestos son tridimensionales y en muchas ocasiones es necesario dibujar la distribución de los átomos y los enlaces en el espacio. El átomo de carbono, según sea su hibridación, es tetraédrico, trigonal plano o lineal.

Se utilizan trazos continuos para indicar los enlaces que se encuentran en el plano, continuos pero gruesos y en forma de “cuña” () para indicar los enlaces que se encuentran fuera del plano y hacia adelante y con trazos discontinuos () cuando el enlace está dirigido hacia atrás.

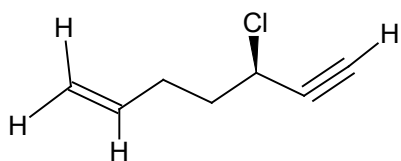
Por ejemplo, la fórmula simplificada anterior puede corresponder a dos compuestos distintos:



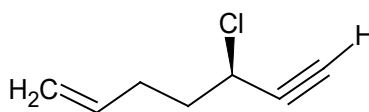
Además, la estructura de un compuesto puede dibujarse desde diferentes perspectivas lo que dificulta aún más su representación; por eso, se recurre habitualmente a la modelización bien con software específico o con modelos moleculares (que es el mejor procedimiento para visualizar las estructuras de los compuestos)



e) **Mixtas.** Combinan alguna de las características de las representaciones anteriores. Se utilizan con mucha frecuencia.



o bien



Grupo funcional: Unidad estructural definida y responsable principal de las propiedades y reactividad química de una molécula. Por ejemplo, el grupo hidroxilo (-OH) de los alcoholes.

Serie homóloga: Grupo de compuestos con el mismo grupo funcional cuya diferencia formal está en el número de metilenos que contienen. A todos los miembros de una misma serie se les llama homólogos y muestran propiedades químicas similares. Por ejemplo: la serie homóloga de los alcoholes primarios poseen un grupo hidroxilo (-OH) en un carbono terminal o primario.

Isómeros: Compuestos con la misma fórmula molecular pero distinta estructura y por lo tanto, con distintas propiedades y configuración. Por ejemplo, el etanol y el dimetil éter, ambos con fórmula molecular C_2H_6O .

NOMENCLATURA EN QUÍMICA ORGÁNICA

Para nombrar los compuestos orgánicos también se toma como base las recomendaciones de la IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*). La finalidad sigue siendo la de dar a cada compuesto un nombre inequívoco y la asignación de una sola estructura a cada nombre. Para ello, **la nomenclatura sistemática** es de gran utilidad, ya sea ésta *nomenclatura sustitutiva*, *de grupo funcional* o *multiplicativa*. La formación de un nombre sistemático para un compuesto orgánico requiere de la selección y posterior nombramiento de una *estructura principal* o *estructura de referencia* (en líneas generales será la cadena más larga que contenga al grupo funcional más importante). Éste se toma como el nombre básico que puede entonces modificarse mediante prefijos, infijos y sufijos (en el caso de una estructura principal heterofuncional) y localizadores de éstos, que transmiten con precisión los cambios estructurales necesarios para generar el compuesto en cuestión a partir de la *estructura de referencia*.

En contraste con tales nombres sistemáticos, hay *nombres tradicionales* que son ampliamente utilizados tanto en la industria como en círculos científicos y académicos (ácido acético, benceno, urea, piridina,...) Cuando estos *nombres tradicionales* cumplen con los requisitos de utilidad y cuando se ajustan al patrón general de la nomenclatura sistemática, se conservan.

Las últimas recomendaciones de la IUPAC para compuestos orgánicos son las publicadas en 2013⁵. Éstas modifican las anteriores de 1993⁶ (que a su vez lo hicieron con las de 1979). El cambio más significativo que introdujeron las de 1993, consistió en colocar los localizadores numéricos que indican la posición de la insaturación (o del grupo funcional principal) inmediatamente delante del sufijo que lo designa (pent-1-eno o pentan-1-ol en lugar de 1-penteno o 1-pentanol).

En las recomendaciones IUPAC de 2013 la novedad más relevante es la aparición del "*Preferred IUPAC Name*" (PIN), que podríamos traducir como *Nombre IUPAC Preferente*. Otros nombres alternativos al "preferente" son válidos siempre que respondan a los criterios de una de las nomenclaturas sistemáticas aceptadas y no sean ambiguos.

Otras novedades de interés introducidas en las recomendaciones IUPAC de 2013 son: mayor limitación en el uso de nombres tradicionales; prevalece la longitud de la cadena a la insaturación en cadenas hidrocarbonadas acíclicas; Al, Ga, In y Tl son ahora "elementos orgánicos".

⁵ Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013. Henri A. Favre, Warren H. Powell. Royal Society of Chemistry, 2013

⁶ IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*, 1993, Blackwell Scientific publications, Copyright 1993 IUPAC.

CLASIFICACIÓN DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS

Los compuestos orgánicos se organizan por grupos o familias que se caracterizan por tener un mismo grupo funcional y se clasifican en función de éstos de la siguiente manera:

HIDROCARBUROS

Los hidrocarburos son compuestos que contienen solo carbono e hidrógeno, y están divididos en dos grupos principales: hidrocarburos alifáticos e hidrocarburos aromáticos

Los hidrocarburos alifáticos se clasifican a su vez en tres grupos principales: alcanos (o hidrocarburos saturados), alquenos y alquinos (o hidrocarburos insaturados). Los alcanos son hidrocarburos en donde todos los enlaces son sencillos; los alquenos contienen dobles enlaces carbono-carbono y los alquinos contienen triples enlaces carbono-carbono. Los hidrocarburos alifáticos pueden ser de cadena abierta (ya sea lineal o ramificada) o cerrada (hidrocarburos alicíclicos).

Los hidrocarburos aromáticos son también llamados **arenos** y el compuesto más representativo de este grupo es el **benceno**

COMPUESTOS ORGÁNICOS CON GRUPOS FUNCIONALES CON HETEROÁTOMOS.

Compuestos halogenados: En la molécula hay átomos de carbono, hidrógeno y uno o más halógenos iguales o diferentes.

Compuestos oxigenados: En la molécula hay átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno. Son alcoholes, éteres, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos y sus derivados: anhídridos de ácido, ésteres, halogenuros de ácido (contiene también halógeno en su molécula), amidas (contienen también nitrógeno en su molécula) y sales metálicas (contienen metal en su estructura).

Compuestos nitrogenados: En la molécula hay átomos de carbono, hidrógeno y nitrógeno. Son aminas, iminas, nitrilos, amidas (contiene también oxígeno), nitroderivados (contienen también oxígeno).

Compuestos que contiene azufre en la molécula (además de carbono e hidrógeno): tioles y tioéteres (o sulfuros).

Es habitual que en un mismo compuesto existan a la vez varias funciones (compuestos heterofuncionales). Para nombrarlos hay que tener en cuenta el orden de preferencia de los distintos grupos funcionales que contenga la molécula. Como veremos más adelante, este orden de preferencia nos permite elegir la cadena principal a partir de la cual nombraremos un compuesto orgánico. De acuerdo con las recomendaciones

IUPAC⁷ el orden de preferencia para la elección del grupo principal es: ácidos carboxílicos y ácidos sulfónicos > derivados de ácidos carboxílicos (en el siguiente orden: anhídridos > ésteres > haluros de ácido > amidas = sales) > nitrilos > aldehídos > cetonas > alcoholes y fenoles > tioles > aminas > iminas > compuestos carbonados > éteres > tioéteres (sulfuros) > compuestos halogenados (F > Cl > Br > I) y nitroderivados.

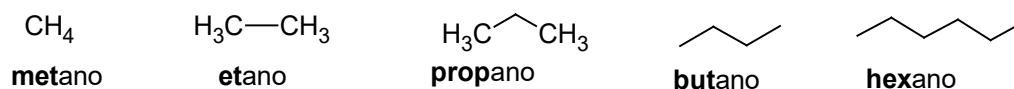
ALCANOS

ALCANOS LINEALES (C_nH_{2n+2})

Los alcanos lineales se nombran con un prefijo que indica el número de átomos de carbono, seguido del sufijo **ano**.

Número de carbonos	Nombre	Fórmula	Número de carbonos	Nombre	Fórmula
1	metano	CH ₄	14	tetradecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃
2	etano	CH ₃ CH ₃	15	pentadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃
3	propano	CH ₃ CH ₂ CH ₃	16	hexadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃
4	butano	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	17	heptadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃
5	pentano	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃	18	octadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃
6	hexano	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	19	nonadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃
7	heptano	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	20	eicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃
8	octano	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	21	heneicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₉ CH ₃
9	nonano	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	22	docosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₀ CH ₃
10	decano	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃	23	tricosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₁ CH ₃
11	undecano	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃	24	tetracosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₂ CH ₃
12	docecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃	30	triacontano	CH ₃ (CH ₂) ₂₈ CH ₃
13	tridecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃	40	tetracontano	CH ₃ (CH ₂) ₃₈ CH ₃

Tabla 20. Ejemplos de Hidrocarburos Alifáticos.



ALCANOS RAMIFICADOS (C_nH_{2n+2})

Para nombrar los alcanos ramificados es preciso definir antes lo que se entiende en nomenclatura por **grupos alquilo** (se forman a partir de un alcano por pérdida de un átomo de H).

⁷ Sección P-41 (pág.420-422) en *Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013* (IUPAC Blue Book).

Los **grupos alquilo lineales** se nombran reemplazando la terminación **ano** por **il(o)**. Por ejemplo: $-\text{CH}_3$, metilo, $-\text{CH}_2\text{CH}_3$, etilo; $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$, propilo; $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$, butilo.

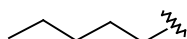
Los **radicales alquilo ramificados** se puede nombrar de dos maneras sistemáticas diferentes:

I) Se elige la cadena lineal más larga, teniendo en cuenta que el carbono 1 de ésta es el que está unido al cadena principal, sus sustituyentes (si los tuviera) se nombran y localizan con numeradores (si fuera necesario) y se nombran el radical completo terminado en **il(o)**, que luego se incorpora, entre paréntesis y precedido de su localizador (en caso necesario) al nombre del compuesto en cuestión.

II) Esta otra nomenclatura sistemática para radicales alquilo, se aplica tanto a cadenas laterales lineales como ramificadas y consiste en tomar el nombre del correspondiente hidrocarburo y sustituir la **o** final por **il(o)**, incluyendo un localizador numérico antes de **-il(o)** que indica el carbono de dicha cadena lateral a través del cual el radical se une al resto de la molécula. También, se incorpora entre paréntesis y precedida de su localizador al nombre del compuesto en cuestión. (Ver ejemplos siguientes).

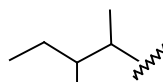
No debemos dejar de mencionar que algunos grupos alquilo ramificados poseen nombres comunes (admitidos por IUPAC), como por ejemplo **isopropilo** $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ cuyo nombre sistemático es metiletilo (nomenclatura I) o propan-2-ilo (PIN) (nomenclatura II)

Ejemplos:



pentil(o)

pentan-1-il(o) (PIN)



2,3-dimetilbutil(o)

3-metilpentan-2-il(o) (PIN)

Si los sustituyentes poseen dos enlaces unidos al mismo carbono de la cadena principal, se nombra como el alcano del que deriva pero se cambia **ano** por **ilideno(o)**. Por ejemplo:

$\text{CH}_2=$ metilideno

$\text{CH}_3-\text{CH}=$ etilideno

Reglas para nombrar los **alcanos ramificados**

Regla I. Encontrar y nombrar la cadena más larga de la molécula. El resto de grupos unidos a la cadena principal y que no sean H se denominan sustituyentes. Si la molécula tiene dos o más cadenas de igual longitud, la cadena principal será la cadena con mayor número de sustituyentes.

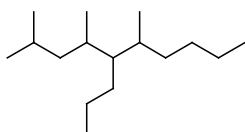
Regla II. Se numera de un extremo a otro, asignando los números más bajos posibles a los carbonos con cadenas laterales. Si coinciden por ambos lados, se usa el orden alfabético para decidir cómo numerar la cadena principal.

Regla III. Nombrar todos los grupos unidos a la cadena principal como sustituyentes alquilo precedidos por un localizador separado por un guion del nombre del sustituyente y éste entre paréntesis (si fuera necesario).

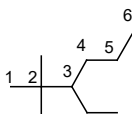
Regla IV. El nombre del alcano se escribe comenzando por el de los sustituyentes en orden alfabético, cada uno precedido por el número del C de la cadena principal al que está unido (localizador) y un guion y a continuación (sin espacios) se añade el nombre de la cadena principal. Si una molécula contiene más de un sustituyente alquilo del mismo tipo, su nombre irá precedido del prefijo di, tri, tetra, penta, etc. Estos prefijos no se tienen en cuenta a la hora de ordenar alfabéticamente los sustituyentes, **excepto** cuando éstos forman parte de un sustituyente complejo (incluido en el paréntesis)⁸.

Por último, recordar que entre letra y número se escribe un guion y entre dos números se escribe una coma.

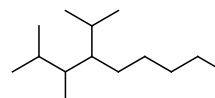
Ejemplos:



2,4,6-trimetil-5-propildecano



3-etil-2,2-dimetilhexano



2,3-dimetil-4-(propan-2-il)nonano (PIN)
4-isopropil-2,3-dimetilnonano

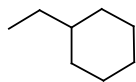
ALCANOS CÍCLICOS

Se nombran anteponiendo el prefijo ciclo al nombre del alcano de cadena abierta del mismo número de carbonos.

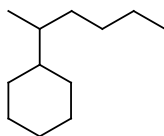
Para alcanos cíclicos sustituidos, si hay más de un sustituyente, hay que numerar los carbonos del anillo eligiendo la secuencia numérica que asigne los valores más bajos a éstos.

Ejemplos:

⁸ Si existen dos o más cadenas laterales complejas (fundamentalmente heterofuncionales) idénticas, se utilizan los prefijos **bis-**, **tris-**, **terakis-**, **pentakis-**, etc., para indicar su número. Estos prefijos **sí** se tienen en cuenta en el orden alfabético de los sustituyentes. Para determinar su uso exacto, ver sección P-16.3 en *Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013* (IUPAC Blue Book).



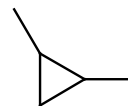
etilciclohexano



(hexan-2-il)ciclohexano (PIN)

(1-metilpentil)ciclohexano

2-ciclohexilhexano

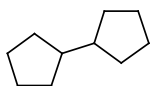


1,2-dimetilciclopropano

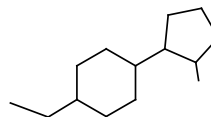
Las posibles combinaciones de anillos en una estructura son muy variadas, siendo los casos más frecuentes:

- Dos anillos de igual o de distinto tamaño unidos por un enlace sencillo C-C.
- Dos anillos unidos por un átomo de carbono común (espiranos).
- Varios anillos unidos por "puentes".

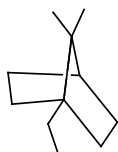
Los analizaremos someramente a través de unos ejemplos⁹:



1,1'-bi(ciclopentano)

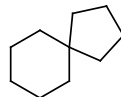


1-etil-4-(2-metilciclopentil)ciclohexano



1-etil-7,7-dimetilbiciclo[2.2.1]heptano

(Número total de carbonos los ciclos: 7. Número de carbonos "puente" ordenados de mayor a menor, [2.2.1])



espiro[4.5]decano

(Número total de carbono pertenecientes a los ciclos: 10. El anillo menor con 4 átomos de carbono distinto al carbono común (carbono espiránico) y el mayor con 5)

ALQUENOS

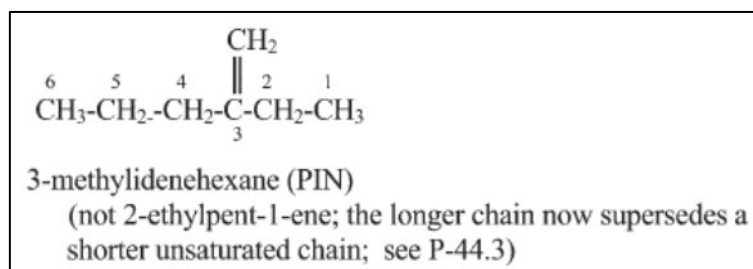
Se nombran igual que los alcanos pero con la terminación **eno**. Los sistemas más complicados requieren adaptaciones y extensiones de las reglas de nomenclatura de los alcanos.

El alqueno más pequeño conserva su nombre común **etileno** (eteno). Y el radical $\text{CH}_2=\text{CH}-$, derivado de él, también conserva su nombre común, **vinil(o)** (etenilo, en nomenclatura sistemática)

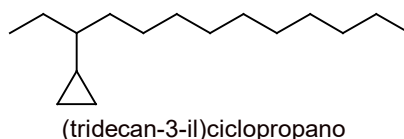
⁹ Para una mayor profundización sobre este tópico, ver *Nomenclatura y Representación de los Compuestos Orgánicos. Una guía de estudio y autoevaluación*. Emilio Quiñó Cabana, Ricardo Riguera Vega. Mc Graw Hill, 2ª edición, 2005.

Regla I. Según las recomendaciones IUPAC de 1993 se elige como cadena principal la más larga que contenga el mayor número de insaturaciones. Sin embargo en las recomendaciones IUPAC de 2013 se le da prioridad a la longitud de la cadena frente al número de insaturaciones que contenga:

En la sección P61-3.1 (*Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*) se dice literalmente y se ejemplifica como sigue: “el primer criterio a considerar al elegir una cadena acíclica principal preferida es la longitud de la cadena; la insaturación es ahora el segundo criterio”.



En el caso de hidrocarburos que contienen partes cíclicas en su estructura se le da prioridad a éstas frente a los sustituyentes de cadena abierta. Por ejemplo:

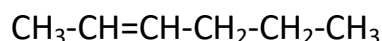


Regla II. Cuando sea necesario, se indica la posición del doble o triple enlace en la cadena mediante un número (localizador), empezando por el extremo que al doble o triple enlace le asigne el número más bajo.

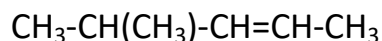
Regla III. Los sustituyentes y sus posiciones se añaden delante del nombre del alqueno. Si hay más de un doble enlace, se indica con la terminación dieno, trieno, etc.

Ejemplos:

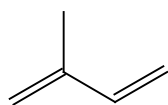
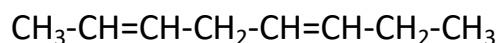
a) hex-2-eno



b) 4-metilpent-2-eno

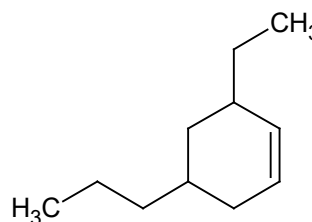


c) octa-2,5-dieno



isopreno

2-metilbuta-1,3-dieno



3-etil-5-propilciclohex-1-eno

ALQUINOS

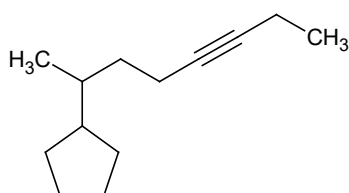
Se nombran igual que los alcanos pero con la terminación **ino**, y cuando sea necesario, se indica la posición del triple enlace con el localizador más bajo posible. Si hay ramificaciones y/o más de un triple enlace, se cumplen las mismas normas que con los alquenos.

El alquino más pequeño conserva su nombre común **acetileno** (etino) ($\text{HC}\equiv\text{CH}$).

Cuando hay dobles y triples enlaces en la cadena, la cadena se nombra de forma que los localizadores de las insaturaciones sean lo más bajos posible, sin distinguir entre dobles o triples enlaces. Si la numeración coincidiera, tiene preferencia el doble frente al triple aunque siempre se terminará con el sufijo **ino** quedando **en** como infijo.

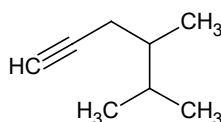
En el caso de un compuesto con fragmentos hidrocarbonados cíclicos en su estructura, se le da prioridad al ciclo frente a los sustituyentes de cadena abierta y si contiene más de un ciclo, tiene prioridad el ciclo con mayor número de carbonos.

Ejemplos:

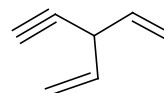


7-ciclopentil-oct-3-ino

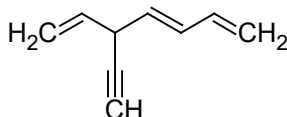
oct-5-in-2-ilciclopentano (PIN)



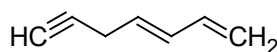
4,5-dimetilhex-1-ino



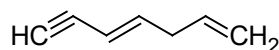
3-etinilpenta-1,4-dieno



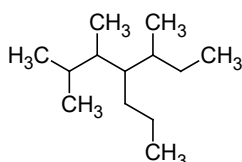
5-etinilhepta-1,3,6-trieno



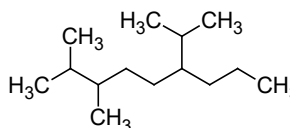
hepta-1,3-dien-6-ino



hepta-3,6-dien-1-ino

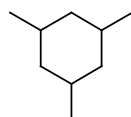


2,3,5-trimetil-4-propilheptano

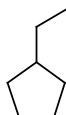


2,3-dimetil-6-(propan-2-il)nonano (PIN)

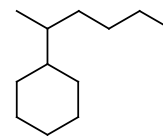
6-isopropil-2,3-dimetilnonano



1,3,5-trimetilciclohexano



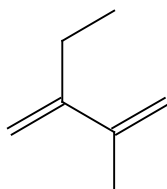
etilciclopentano



(hexan-2-il)ciclohexano (PIN)

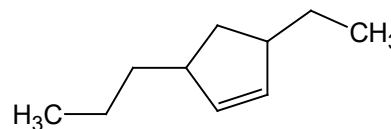
(1-metilpentil)ciclohexano

2-ciclohexilhexano

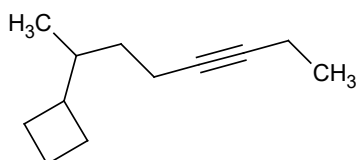


2-metil-3-metilidenopent-1-eno (PIN)

2-etil-3-metilbuta-1,3-dieno

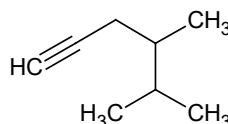


3-etil-5-propilciclopenteno

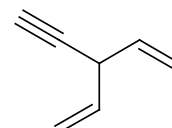


7-ciclobutiloct-3-ino

oct-5-in-2-ilciclobutano (PIN)



4,5-dimetilhex-1-ino



3-etinilpenta-1,4-dieno

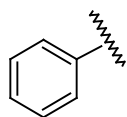
HIDROCARBUROS AROMÁTICOS

El compuesto más representativo de este grupo es el **benceno** (C_6H_6). Su molécula está constituida por un ciclo de seis carbonos enlazados cada uno de ellos a un átomo de hidrógeno. La deslocalización electrónica característica de estos compuestos se representa en su fórmula mediante un círculo inscrito dentro del anillo de seis miembros o mediante tres dobles enlaces alternados (ver ejemplos). Si hay un solo sustituyente se añade como prefijo al nombre de **benceno**. Para bencenos disustituídos, tenemos tres posibilidades de localización de éstos en el anillo: **1,2 (orto)**, **1,3 (meta)** y **1,4 (para)**. Los sustituyentes se citan en orden alfabético.

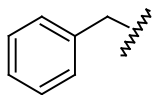
Se conservan algunos nombres tradicionales como **tolueno** (metilbenceno); **orto**, **meta** o **para xileno** (dimetilbenceno). Muchos radicales derivados de benceno conservan también sus nombres tradicionales. Entre los más habituales están **fenilo** (C_6H_5-) y **bencilo**¹⁰.

Ejemplos:

¹⁰ C_6H_5- es el radical **fenilo** que también se representa como **Ar-** o **Ph-**



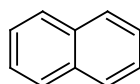
fenil(o)



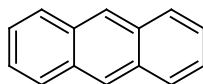
bencil(o)



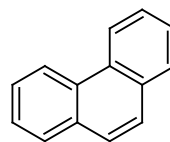
benceno



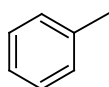
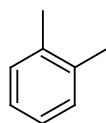
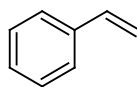
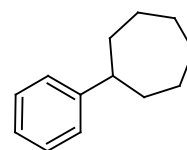
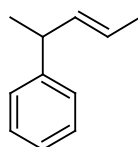
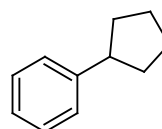
naftaleno



antraceno



fenantreno

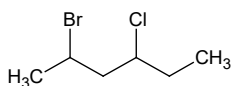

tolueno
metilbenceno

o-xileno
1,2-dimetilbenceno

estireno
etenilbenceno
vinilbenceno

fenilcicloheptano (PIN)
cicloheptilbenceno

pent-3-en-2-ilbenceno (PIN)
4-fenilpent-2-eno


ciclopentilbenceno

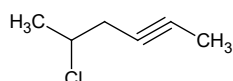
En el caso de un compuesto con hidrocarburos cíclicos, se le da prioridad a éste frente a los sustituyentes de cadena abierta y si la cadena principal y los sustituyentes son cíclicos, se toma como estructura principal el ciclo con mayor número de carbonos (ver ejemplos anteriores).

DERIVADOS HALOGENADOS (R-X).

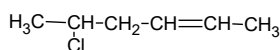
Se trata de compuestos hidrocarbonados en los que se sustituye uno o varios átomos de hidrógeno por uno o varios átomos de halógenos. Se **nombran y representan** igual que el hidrocarburo del que procede indicando previamente el lugar y nombre del halógeno como si fuera un sustituyente alquílico. Se conservan algunos nombres comunes como el cloroformo CHCl_3 (triclorometano). Otro nombre común es el cloruro de metilo (clorometano).



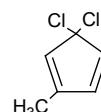
2-bromo-4-chlorohexane



5-clorohex-2-ino



5-clorohex-2-eno



5,5-dicloro-2-metilciclopenta-1,3-dieno

ALCOHOLES (R-OH).

Se nombran como derivados de la cadena hidrocarbonada principal pero con la terminación sustituyendo **o** por **ol** (**con un localizador numérico antepuesto a ol y unido a éste por un guion, siempre que sea necesario**). En sistemas ramificados más complejos, el nombre del alcohol deriva de la cadena más larga que contiene el -OH, que no tiene por qué ser la más larga de la molécula sino la que contenga un mayor número de sustituyentes priorizando el -OH. La cadena se numera empezando por el extremo más cercano al -OH (independientemente de que haya enlaces múltiples).

Si hay más de un grupo -OH se utilizan los términos diol, triol, etc. Según el número de grupos hidroxilo presentes, eligiéndose como cadena principal, la cadena más larga que contenga el mayor número de grupos -OH, y numerada de forma que se le asignen los localizadores más bajos a los carbonos enlazados al -OH. Cuando el grupo -OH no es el grupo principal, se nombra como sustituyente utilizando el prefijo **hidroxi**.

Cuando el grupo -OH se encuentra unido a un anillo aromático (benceno) el compuesto recibe el nombre de **fenol** (PIN)¹¹.

En algunos nombre tradicionales se escribe la palabra alcohol seguida del grupo alquilo (pero terminado en **ico**). Por ejemplo, **alcohol etílico** es la forma clásica de nombrar al etanol.

Si un sustituyente se forma por sustitución del hidrógeno del -OH, este sustituyente se nombra como el radical alquilo correspondiente pero terminado en **oxi**. Por ejemplo CH₃O- (metoxi); CH₃CH₂O- (etoxi); CH₂=CH-CH₂-CH₂-O- (but-3-en-1-iloxi), C₆H₅O- (fenoxi); C₆H₅-CH₂-O- (benciloxi)¹².

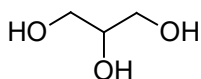
Ejemplos:

petan-2-ol CH₂-CH(OH)-CH₂-CH₂-CH₃

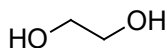
3-metilhexan-2-ol CH₂OH-CH₂-CH(CH₃)-CH₂-CH₂-CH₃

butano-1,3-diol CH₃-CH(OH)-CH₂-CH₂OH

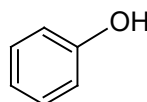
pent-3-en-1-ol CH₂(OH)-CH₂-CH=CH-CH₃



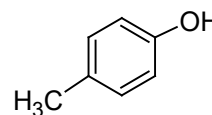
propano-1,2,3-triol
glicerol
glicerina



etano-1,2-diol (PIN)
etilenglicol



fenol



4-metilfenol
p-metilfenol
p-cresol

¹¹ Hidroxibenceno, sería un nombre sistemático para este compuesto.

¹² C₆H₅- es el radical **fenilo** que también se representa como **Ar-** o **Ph-**

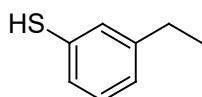
TIOLES (RSH).

Un **tiol** es un compuesto que contiene un grupo funcional igual que hidroxilo (-OH) pero cambiando oxígeno por azufre (-SH) (grupo **tiol**). Se nombran igual que los alcoholes pero sustituyendo **-ol** por **-tiol**.

Ejemplos:

3-metilhexan-2-tiol $\text{CH}_2\text{SH}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

butano-1-3-ditiol $\text{CH}_3-\text{CH}(\text{SH})-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{SH}$



3-etilbencenotiol

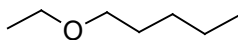
Cuando no es el grupo principal se nombra con el prefijo **sulfanil**

ÉTERES (R-O-R').

La nomenclatura IUPAC preferente para los éteres es la sustitutiva. Trata los éteres como hidrocarburos con un sustituyente alcoxi. Se toma como estructura fundamental al grupo (R) más complejo, mientras que el otro (R') se considera como sustituyente (R'O-) y se nombra como un radical alcoxi.

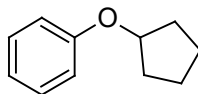
Es muy frecuente encontrar para los éteres otra nomenclatura (también aceptada) en la que se nombran los dos sustituyentes alquílicos seguidos de la palabra éter (nomenclatura por grupo funcional)

Ejemplos:



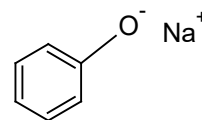
1-etoxipentano (PIN)

metil pentil éter



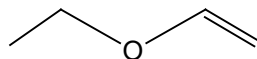
ciclopentiloxibenceno

ciclopentil fenil éter



fenóxido de sodio

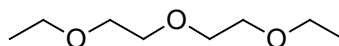
fenolato de sodio



etenil etil éter

etoxieteno

etil vinil éter



3,6,9-trioxaundecano

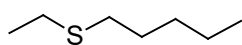
1-etoxi-2-(2-etoxietoxi)etano

TIOÉTERES O SULFUROS (R-S-R').

La nomenclatura IUPAC preferente para los tioéteres es también la sustitutiva. Trata los tioéteres como hidrocarburos con un sustituyente alquilsulfanil. Se considera como estructura fundamental al grupo (R) más complejo, mientras que el otro (R') se considera como sustituyente (R'S-) y se nombra como un radical alquilsulfanilo.

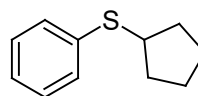
Es muy frecuente encontrar para los tioéteres otra nomenclatura (también aceptada) en la que se nombran los dos sustituyentes alquílicos seguidos de la palabra tioéter (nomenclatura por grupo funcional)

Ejemplos:



1-(etilsulfanil)pentano

metil pentil tioéter



ciclopentilsulfanilbenceno

ciclopentil fenil tioéter

ALDEHÍDOS (R-CHO).

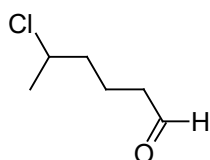
La IUPAC trata a los aldehídos como derivados de hidrocarburos cambiando la terminación **o** por **al** (**o** → **al**). Los sustituyentes de la cadena se numeran empezando por el grupo carbonilo (-C=O). Para evitar confusiones nunca se representa los aldehídos como RCOH , sino como **RCHO**. Los más pequeños conservan nombres tradicionales: **formaldehído** (HCHO), **acetaldehído** (CH_3CHO) y **benzaldehído** $\text{C}_6\text{H}_5\text{CHO}$, entre otros.

Si existen dos grupos -CHO se elegirá como cadena principal la que contiene a dichos grupos y se nombran de igual manera que en el caso anterior finalizando con el sufijo **dial**. Si además contiene insaturaciones (o sustituyentes) se numera la cadena en el sentido que les asigne los localizadores más bajos. Cuando el grupo -CHO , siendo el grupo principal, se encuentra unido a un sistema cíclico el nombre se formará indicando el sistema cíclico seguido de la terminación **carbaldehído**.

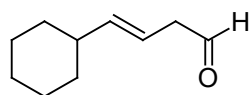
Cuando el grupo -CHO no es grupo principal entonces se nombra con el prefijo **formil**.

Ejemplos¹³:

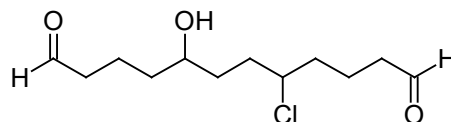
¹³ La nomenclatura referida al estereoisómero representado se verá en el capítulo de *Estereoisómeros*.



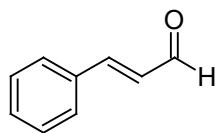
5-clorohexanal



4-ciclohexilbut-3-enal

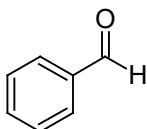


5-cloro-8-hidroxidodecanal

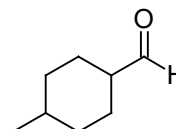


3-fenilprop-2-enal

cinamaldehído



benzaldehído



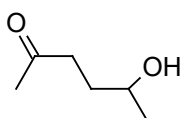
4-metilciclohexanocarbaldehído

CETONAS (R-CO-R').

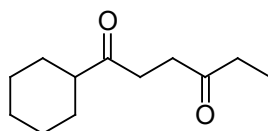
La más pequeña conserva su nombre común: **acetona** (CH_3COCH_3). Las cetonas se nombran finalizando con el sufijo **ona** (**o** $\rightarrow$ **ona**) y anteponiendo a éste el localizador correspondiente (en el caso de ser necesario). Se asigna el número más bajo al carbonilo (**-C=O**) de la cadena sin tener en cuenta la presencia de otros sustituyentes o grupos funcionales como -OH o enlace múltiple (o cualquier otro con menor prioridad). Si hay dos grupos carbonilo se empleará como sufijo **diona**, **triona** (si son tres),...

Cuando el grupo carbonilo se encuentra como grupo sustituyente en una cadena y no es el grupo principal, entonces se nombra con el prefijo **oxo**.

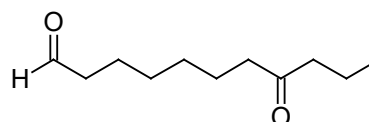
Ejemplos:¹⁴



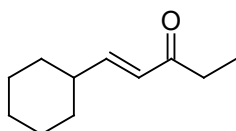
5-hidroxihexan-2-ona



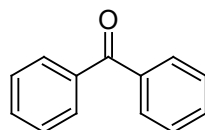
1-ciclohexilhexano-1,4-diona



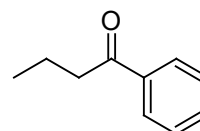
8-oxoundecanal



1-ciclohexilpent-1-en-3-ona



difenilmetanona (PIN)
difenilcetona
benzofenona



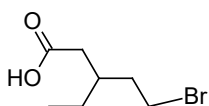
1-fenilbutan-1-ona

¹⁴ La nomenclatura referida al estereoisómero representado se verá en el capítulo de *Estereoisómeros*.

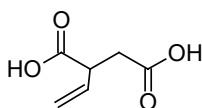
ÁCIDOS CARBOXÍLICOS (R-COOH).

Se nombran con la terminación **oico** (**o** → **oico**) y anteponiendo la palabra **ácido**. Se mantienen los nombres comunes **ácido acético** (CH_3COOH) y **ácido fórmico** (HCOOH). Se asigna al carbono carboxílico el número 1 de la cadena. Tiene preferencia sobre todas las funciones vistas hasta ahora. La cadena principal se elige de forma que incluya, además del grupo $-\text{COOH}$, tantos grupos funcionales como sea posible. Los ácidos cíclicos saturados se nombran como ácidos cicloalcanocarboxílicos. Los ácidos dicarboxílicos se nombran añadiendo al nombre de la cadena hidrocarbonada completa la terminación **dioico** (además de anteponer *ácido*). Cuando el grupo $-\text{COOH}$, siendo el grupo principal, se encuentra unido a un sistema cíclico el nombre se formará indicando el sistema cíclico seguido de la terminación **carboxílico** (además de anteponer la palabra *ácido*).

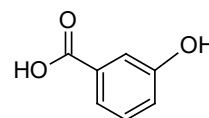
Ejemplos:



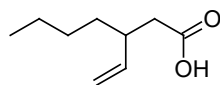
ácido 5-bromo-3-etilpentanoico



ácido 2-etnilbutanodioico



ácido 3-hidroxibenzoico



ácido 3-etnilheptanoico (PIN)
ácido 3-butilpent-4-enoico
ácido 3-(butan-1-il)pent-4-enoico

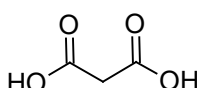
Algunos ácidos con nombres tradicionales:



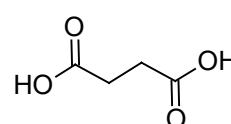
ácido fórmico



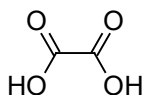
ácido acético



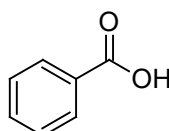
ácido propanodioico
ácido succínico



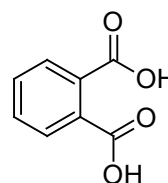
ácido butanodioico
ácido malónico



ácido etanodioico
ácido oxálico



ácido benzoico

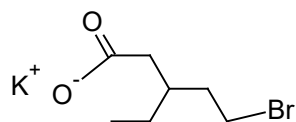


ácido benceno-1,2-dicarboxílico
ácido ftálico

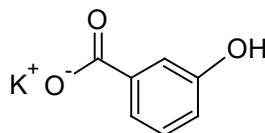
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: SALES (RCOOM).

Las sales orgánicas se nombran como el ácido del cual derivan, eliminando la palabra ácido, cambiando la terminación **oico** por **oato** y seguida del nombre del metal que sustituye al H del grupo OH del ácido.

Ejemplos:



5-bromo-3-etilpentanoato de potasio

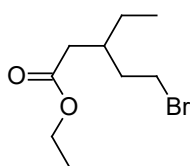


3-hidroxibenzoato de potasio

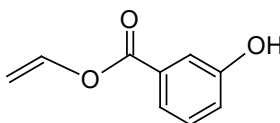
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: ÉSTERES (RCOOR').

Se nombran como las sales anteriores, eliminando la palabra ácido y sustituyendo **ico** por **ato** pero seguido del nombre del radical alquilo que sustituye al H ácido del grupo -COOH.

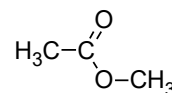
Ejemplos:



5-bromo-3-etilpentanoato de etilo



3-hidroxibenzoato de etenilo



acetato de metilo

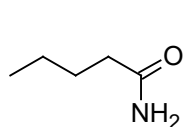
DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: AMIDAS (RCONH₂).

Si la amida es primaria, es decir R-CONH₂, se nombra a partir del ácido del cual deriva, eliminando la palabra ácido, cambiando la terminación **oico** por **amida**. Si se trata de un grupo terminal en una cadena hidrocarbonada principal abierta. Si el grupo -CONH₂ se encuentra unido a un anillo, siendo grupo principal, entonces se nombra como **carboxamida**.

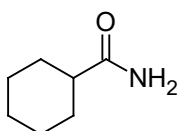
Si las amidas son secundarias (R-CONHR') o terciarias (R-CONR'R'') los sustituyentes que reemplazan a los hidrógenos se localizan empleando la letra **N** y un guion delante del nombre del sustituyente escritos por orden alfabético.

Cuando existen otros grupos funcionales de mayor prioridad se nombra con el prefijo **carbamoil**.

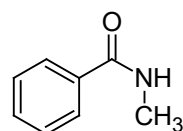
Ejemplos:



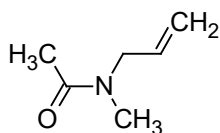
pentanamida



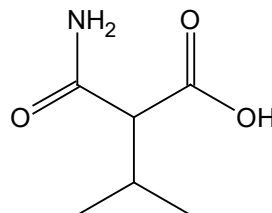
ciclohexanocarboxamida



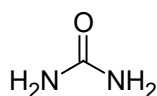
N-metilbenzamida



N-metil-N-(prop-2-en-1-il)acetamida



ácido 2-carbamoil-3-metilbutanoico



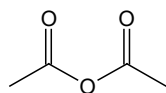
urea

DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: ANHÍDRIDOS (R-COOCO-R').

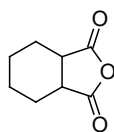
Formalmente un anhídrido procede de la condensación de dos ácidos carboxílicos, R-COOH y R'COOH, con eliminación de una molécula de agua.

Si R y R' son iguales (anhídridos simétricos) o las dos funciones ácido pertenecen a una misma estructura carbonada (anhídridos cíclicos) se nombran como el ácido del que proceden pero cambiando la palabra ácido por anhídrido (si fuera necesario, se utilizan localizadores, como veremos en algún ejemplo). Si R y R' son distintos (anhídridos mixtos) se nombran con la palabra anhídrido seguida de los nombres de los dos ácidos que lo constituyen, en orden alfabético.

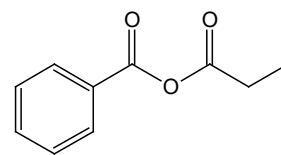
Ejemplos:



anhídrido acético



anhídrido ciclohexano-1,2-dicarboxílico



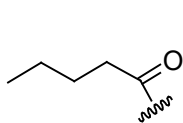
anhídrido benzoico propanoico

SUSTITUYENTES O RADICALES ACILO (R-CO-).

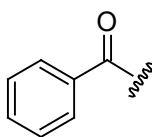
Son muy útiles para nombrar, sobretodo, los haluros de ácido (y también algunas cetonas)

Se nombran eliminando la palabra **ácido** y sustituyendo **ico** por **ilo**

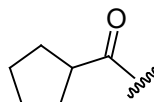
Ejemplos:



pentanoil(o)



benzoil(o)



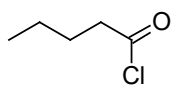
ciclopentanocarbonil(o)

DERIVADOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS: HALUROS DE ÁCIDO (RCOX).

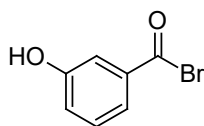
Se nombra citando el nombre del anión haluro (-X) seguido de la preposición de y del nombre del sustituyente acilo (R-CO-).

Cuando hay varios haluros de acilo, está en una cadena lateral o existen otros grupos funcionales de mayor prioridad, el grupo acilo tiene carácter de sustituyente y se nombra con los prefijos (X → **haluro** y C=O → **oxo**) localizados sobre el mismo carbono. Otra forma es mediante el prefijo **halurocarbonil** (-COX) (fluorurocarbonil-, clorurocarbonil,...)

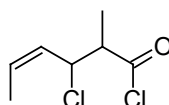
Ejemplos¹⁵:



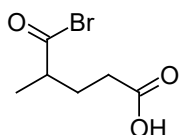
cloruro de
pentanoilo



bromuro de
3-hidroxibenzoilo



cloruro de
3-cloro-2-metilhex-4-enoilo



ácido 5-bromo-4-metil-5-oxopentanoico (PIN)
ácido 4-bromurocarbonilpentanoico

AMINAS (RNH₂).

Se reemplaza la terminación **o** del hidrocarburo por la terminación **amina**. La posición del grupo funcional se indica mediante un localizador que designa el átomo de C al cual está unido (como en los alcoholes).

En el caso de aminas secundarias y terciarias (si empleamos *nomenclatura sustitutiva*), el sustituyente alquílico más complejo del nitrógeno se escoge como raíz. Los

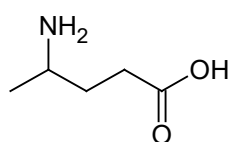
¹⁵ La nomenclatura referida al estereoisómero representado se verá en el capítulo de *Estereoisómeros*.

demás se nombran usando la letra N- seguida de los sustituyentes adicionales en orden alfabético.

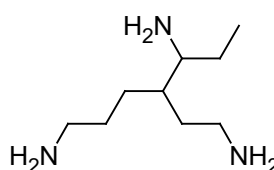
La *nomenclatura de grupo funcional*, (y muchos nombres comunes) se basa en la denominación de alquilamina, como por ejemplo la trietilamina $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_3\text{N}$, etilamina $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{NH}_2$, dimetilamina $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, etc... En este tipo de nomenclatura se nombran los sustituyentes R,R' y/o R'' en orden alfabético seguidos de **-amina**.

Si se considera como sustituyente, por ejemplo si forma parte de una estructura con grupos funcionales de mayor prioridad, se nombra mediante el prefijo **amino** (nombrándose dicho sustituyente como la amina de la que “formalmente” procede).

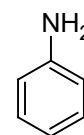
Ejemplos:



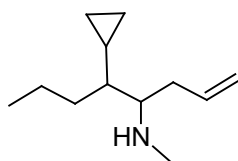
ácido 4-aminopentanoico



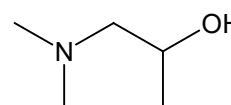
4-(2-aminoetil)heptano-1,5-diamina



anilina



5-ciclopropil-N-metiloct-1-en-4-amina



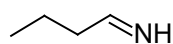
1-(dimetilamino)propan-2-ol

IMINAS (R-C=NH o R-C=NR').

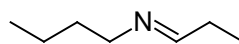
En el caso de la R-C=NH iminas se nombran como la cadena hidrocarbonada principal pero terminada cambiando **o** por **imina** (**o** $\rightarrow$ **imina**) con el uso de localizadores si fuera necesario.

Para las R-C=N-R' , el radical alquílico menor se nombra como sustituyente (prefijo) precedido de N-

Ejemplos:



butan-1-imina



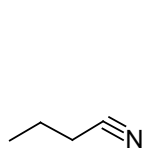
N-butilpropan-1-imina

NITRILOS (o cianuros) (RCN).

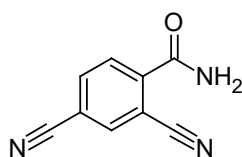
Se nombran como el hidrocarburo de la cadena principal que lo contiene más **nitrilo** (sin espacios). El menor se llama **acetónitrilo** ($\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{N}$). La cadena se numera como en los ácidos carboxílicos, ya que este grupo debe ir en el extremo de la cadena. Cuando no es el grupo principal, el prefijo empleado para el sustituyente $\text{C}\equiv\text{N}$ es **ciano**. En sistemas cíclicos, se nombra el hidrocarburo cíclico+ciclocarbonitrilo (sin espacios).

Los nitrilos también pueden nombrarse por *nomenclatura por grupo funcional*. En este caso, a la palabra **cianuro** que se refiere al grupo $-\text{CN}$ le sigue **de** el nombre del sustituyente (radical, R).

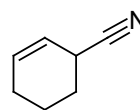
Ejemplos:



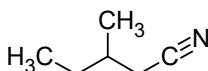
butanonitrilo (PIN)
cianuro de propilo



2,4-dicianobenzamida



ciclohex-2-eno-1-carbonitrilo

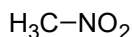


3-metilpentanonitrilo (PIN)
cianuro de 2-metilbutilo

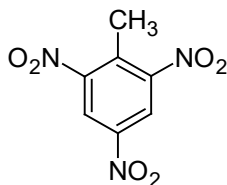
NITRODERIVADOS (RNO_2)

En todos los compuestos que contienen el grupo NO_2 , se designan a éste mediante el prefijo **nitro** (con el empleo de un localizador numérico seguido de un guion, en el caso de que sea necesario). Nunca se considera a dicha función como grupo principal.

Ejemplos:



nitrometano



2-metil-1,3,5-trinitrobenceno (PIN)
1,3,5-trinitrotolueno

COMPUESTOS ORGÁNICOS HETEROFUNCIONALES

Los compuestos heterofuncionales se nombran con las mismas reglas que los monofuncionales. La única diferencia es que a uno de ellos hay que elegirlo como grupo principal (que es el que determina los localizadores y la cadena principal) y los demás se

nombran como sustituyentes. Para designar el grupo funcional se emplea un sufijo (y prefijos para los sustituyentes).

Para seleccionar el grupo principal de entre los que existan en un compuesto determinado, se hace uso del orden de preferencia, que se indica en la tabla siguiente. En esta tabla los grupos funcionales están ordenados por prioridad decreciente. Contiene también los prefijos y sufijos que se han de usar cuando un grupo es considerado como sustituyente o como grupo principal respectivamente. Ciertos grupos funcionales se describen por su prefijo exclusivamente (ver final de la tabla 1 y la tabla 2).

Tabla 21. Grupos funcionales ordenados por prioridad decreciente.

GRUPO FUNCIONAL	FÓRMULA	PREFIJO	SUFIJO
Ácidos carboxílicos	-(C)OOH -COOH	----- Carboxi-	Ácidooico Ácidocarboxílico
Anhídridos	-(C)O-O-(C)O- -CO-O-CO-	----- -----	Anhidridooico Anhidridocarboxílico
Ésteres	-(C)OOR -COOR	----- (R)-oxicarbonil-	---oato (de R) carboxilato de (R)
Haluros de ácido	-(C)O-X -CO-X	----- -----	Haluro deoilo Haluro carbonilo
Amidas	-(C)O-NH ₂ -CO-NH ₂	----- carbamoil-	-amida -carboxamida
Nitrilos	-(C)N -CN	----- ciano-	-nitrilo -carbonitrilo
Aldehídos	-(C)HO -CHO	oxo- formil-	-al -carbaldehído
Cetonas	>C=O	oxo-	-ona
Alcoholes y fenoles	-OH	hidroxi-	-ol
Tioles	-SH	sulfanil-	-tiol
Hidroperóxidos	-O-OH	hidroperoxi-	-----
Aminas	-NH ₂	amino-	-amina
Iminas	=NH (=NR)	imino-	-imina
Éteres	-OR	(R)-oxi-	-----
Tioéteres (sulfuros)	-SR	(R)-sulfanil	-----
Peróxidos	-OO-R	(R)-peroxi-	-----

R representa un grupo sustituyente, (C) quiere decir que es un átomo de carbono incluido en el nombre de la estructura fundamental y que no pertenece al grupo designado por el sufijo o prefijo correspondiente.

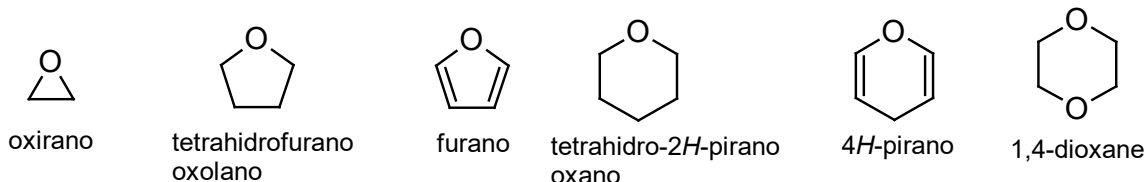
Tabla 22. Grupos funcionales descritos exclusivamente mediante el uso de prefijos.

Grupo	Prefijo	Grupo	Prefijo
-F	fluoro-	=N ₂	diazo-
-Cl	cloruro-	-N ₃	azida-
-Br	bromuro-	-NO	nitroso-
-I	yodo-	-NO ₂	nitro-

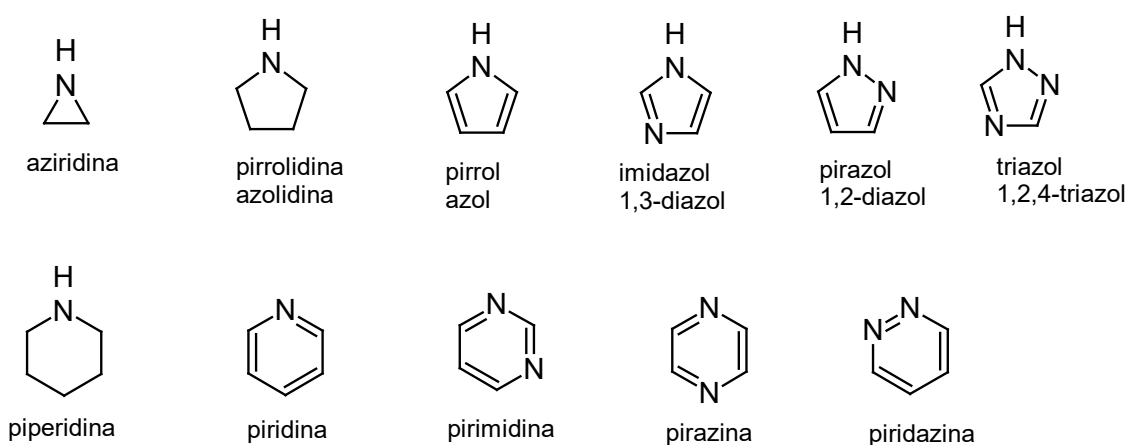
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS

La nomenclatura de compuestos heterocíclicos es compleja. Además de los nombres sistemáticos, conservan y se aceptan muchos de sus nombres tradicionales. A continuación nombraremos algunos heterociclos de interés.

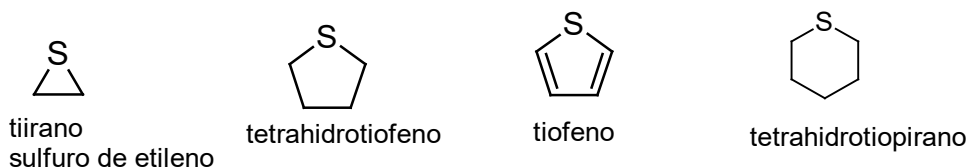
HETEROCICLOS OXIGENADOS



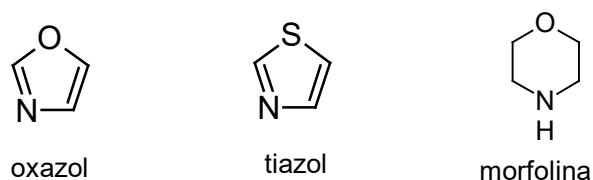
HETEROCICLOS NITROGENADOS



HETEROCICLOS BASADOS EN AZUFRE



HETEROCICLOS CON DISTINTOS TIPOS DE HETEROÁTOMOS.



ESTEREOISÓMEROS

Isómeros son compuestos con la misma fórmula molecular pero distinta estructura. Los estereoisómeros son compuestos isómeros con la misma conectividad entre todos sus átomos pero que difieren en la disposición espacial de alguno de éstos. Por lo tanto, solo podemos diferenciarlos con una representación en perspectiva. Para nombrar los estereoisómeros, se añade a sus nombres (construidos de acuerdo con las

normas de nomenclatura vistas) unos prefijos denominados **descriptores estereoquímicos** que informan del estereoisómero representado. El nombre de los compuestos estereoisómeros solo se diferencia en sus descriptores estereoquímicos. En los nombres tradicionales no aparecen estos descriptores porque ya están “implícitos” en dicho nombre (como ya veremos en los ejemplos).

ISOMERÍA CIS-TRANS Y CONVECIÓN E/Z.

Estos descriptores se utilizan para distinguir entre los estereoisómeros que se diferencian únicamente por tener un átomo o grupo de átomos en distinta posición respecto de un plano determinado.

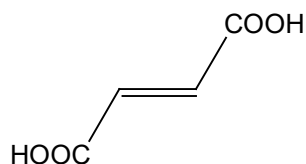
La convención *E/Z* es más genérica y abarca a la *cis-trans* (que se emplea para alquenos disustituídos 1,2 sobre carbonos vecinales o sistemas análogos). Para aplicar la convención *E/Z* a alquenos se siguen las siguientes normas:

Regla I. Se siguen las reglas de secuencia de Cahn, Ingold y Prelog (ver sección correspondiente en el apartado de compuestos quirales) para “ordenar” los sustituyentes de los carbonos que forman el doble enlace y se selecciona el sustituyente de mayor prioridad para cada uno de los carbonos del doble enlace.

Regla II. Se compara la posición de los sustituyentes de mayor prioridad de ambos carbonos olefínicos. Si están a un mismo lado del plano que contiene a estos carbonos, se trata del isómero **Z** (del alemán, *zusammen*, juntos), (isómero *cis*). Si ambos sustituyentes están en lados opuestos al plano de referencia, decimos que es el isómero **E** (del alemán *entgegen*, opuesto) (isómero *trans*)

Regla III. Para nombrarlo, se añade al principio del nombre el descriptor entre paréntesis y seguido de un guion, como prefijo. Si el compuesto tiene varios dobles enlaces, cada uno de ellos se nombra con su descriptor precedido y sin espacios por el correspondiente localizador.

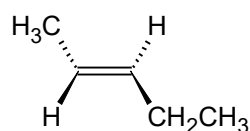
Ejemplos:



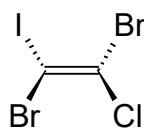
ácido (2*E*)-but-2-enodioico
ácido *trans*-but-2-enodioico
ácido fumárico



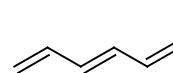
ácido (2*Z*)-but-2-enodioico
ácido *cis*-but-2-enodioico
ácido maleico



(2*E*)-pent-2-eno
(*E*)-pent-2-eno
trans-pent-2-eno



(*Z*)-1,2-dibromo-1-cloro-2-iodoeteno



(3*E*,5*Z*)-hepta-1,3,5-trieno

CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE COMPUESTOS QUIRALES

La configuración absoluta de un *centro estereogénico* (consideraremos solo los **carbonos asimétricos**, esto es, carbonos con sus cuatro sustituyentes diferentes) se especifica mediante el uso de los *descriptores estereoquímicos* R/S que se asignan a cada *centro quiral* aplicando las reglas de la secuencia de Cahn, Ingold y Prelog (“reglas CIP”).

Reglas CIP

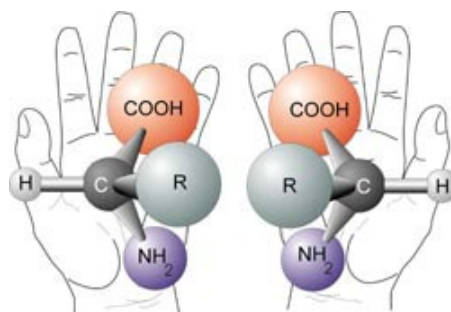
Se comparan los átomos directamente unidos al carbono asimétrico. Los átomos con los números atómicos más altos tienen la mayor prioridad. (Si hay isótopos de un mismo elemento, los más pesados tienen las prioridades más altas).

Si los átomos directamente unidos al centro asimétrico son iguales, se considera el número atómico de los siguientes átomos en la cadena, si éstos son iguales continuamos a los siguientes, y así hasta alcanzar el primer punto de diferencia que permita asignar la prioridad.

Convención R/S

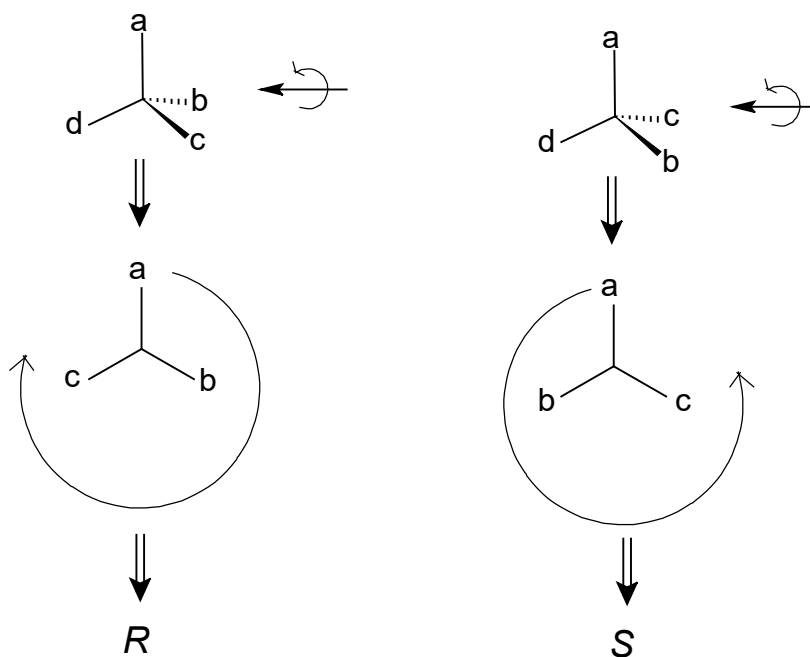
Se ordenan los cuatro sustituyentes de un carbono asimétrico (a, b, c, d) de acuerdo con las reglas CIP en orden de prioridad decreciente: $a > b > c > d$

Representamos espacialmente el carbono asimétrico. Con geometría tetraédrica y orientados los enlaces de manera que el grupo d (el de menor prioridad) esté lo más alejado de nosotros y los otros grupos a, b y c quedan frente al observador. En estas condiciones solo son posibles dos orientaciones para a, b y c. Cada una de ellas coincide con un enantiómero y la relación entre estos estereoisómeros es de quiralidad (son imágenes especulares).



Si para ir de $a \rightarrow b \rightarrow c$ hacemos un giro en el sentido de las agujas del reloj, a este centro quiral se le asigna la configuración absoluta R (Rectus)

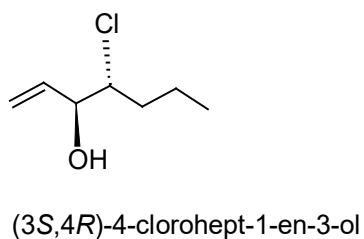
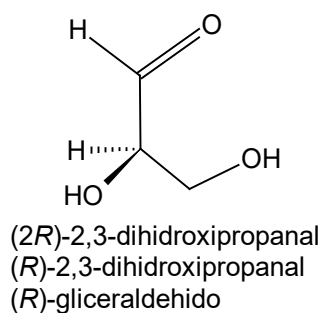
Si para ir de $a \rightarrow b \rightarrow c$ hacemos un giro en sentido contrario al de las agujas del reloj, a este centro quiral se le asigna la configuración absoluta S (Sinister)



Nomenclatura del centro quiral

Al nombre del compuesto se le añade el descriptor R/S que le corresponda, como prefijo, entre paréntesis, con localizadores numéricos si fuera necesario y seguido de guion.

Ejemplos:



NOMENCLATURA DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

INTRODUCCIÓN

Un *compuesto de coordinación* es cualquier compuesto que contenga una **entidad de coordinación**. Una entidad de coordinación o **complejo de coordinación** es un ion o molécula neutra que está compuesta de un **átomo central**, usualmente un metal, al cual están unidos otros átomos o grupos de átomos, cada uno de los cuales se denomina **ligando**. El número total de enlaces que puede dar el metal central se denomina **número de coordinación**. En formulación, la entidad de coordinación se expresa encerrada entre corchetes tanto si está cargada como si no lo está.¹⁶

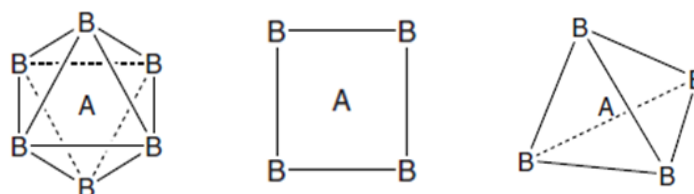
GLOSARIO

Átomo central. El átomo central en una entidad de coordinación es el que se une a otros átomos o grupos de átomos ocupando una posición central en dicha entidad. Los átomos centrales en $[\text{NiCl}_2(\text{OH}_2)_4]$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ y $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ son níquel, cobalto y platino, respectivamente.¹⁷

Ligandos. Son los átomos o grupos de átomos unidos al átomo central. Los ligandos en $[\text{NiCl}_2(\text{OH}_2)_4]$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ y $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ son H_2O , NH_3 , y Cl^- . Los términos “átomo dador” y “átomo ligante” son equivalentes y hacen referencia al átomo del ligando que se une directamente al átomo central.

Poliedro de coordinación. Por lo general los átomos de los ligandos unidos directamente al átomo central definen un poliedro (o polígono) de coordinación alrededor del átomo central. Así en $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ ese poliedro es un ion octaedro, y en $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ es un ion plano-cuadrado (o ion cuadrado). En estos casos el número de coordinación es igual al número de vértices del poliedro de coordinación (aunque no siempre ocurre así, como en el caso de que un ligando se una por dos o más átomos contiguos al átomo central, como ya veremos en algún ejemplo más adelante).

Ejemplos:



De izquierda a derecha: Poliedro de coordinación octaédrica, poliedro de coordinación plano-cuadrada y poliedro de coordinación tetraédrica.

¹⁶ International Unión of Pure and Applied Chem. Brief Guide, 2016.

¹⁷ Para entidades de coordinación más complicadas, véase sección IR-9.2.5, del libro *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book).

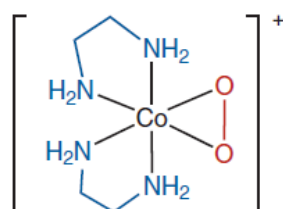
Número de coordinación. Para los compuestos de coordinación típicos, el número de coordinación es igual al número de enlaces σ (sencillos) entre los ligandos y el átomo central. Los enlaces π no se tienen en cuenta para determinar el número de coordinación.

Así en los compuestos de coordinación $[\text{NiCl}_2(\text{OH}_2)_4]$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ y $[\text{PtCl}_4]^{2-}$, los números de coordinación son, respectivamente 6, 6, y 4.

Quelación. La quelación implica la coordinación de un determinado ligando por dos o más átomos ligantes (no contiguos), dadores ambos de un par de electrones σ , a un mismo átomo central. El número de dichos átomos ligantes en un solo ligando quelante se indica con los adjetivos: didentado, tridentado, tetradentado, pentadentado, etc...

Las estructuras cíclicas que se forman cuando dos o más átomos dadores del mismo ligando se unen a un mismo átomo central se llaman *anillos quelato* y el proceso de coordinación de estos átomos dadores recibe el nombre de quelación.

Ejemplo:

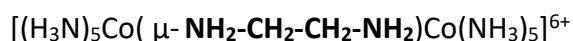


El ligando etano-1,2-diamina, $\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$, es bidentado porque coordina a través de dos átomos dadores con el átomo central, el cobalto, y forma un anillo quelato al coordinarse al átomo central.

El ligando dioxígeno, O_2 , es bidentado, porque coordina a través de dos átomos dadores, pero no forma un anillo quelato.

Si un ligando potencialmente bidentado como **etano-1,2-diamina**, $\text{NH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$, se coordina a dos iones metálicos, no quelata, sino que se coordina de modo monodentado a cada ion metálico. Actúa como ligando puente y se indica con μ .

Ejemplo:



Estado de oxidación. Es la carga neta que tendría el átomo central en una entidad de coordinación si se retirasen todos los ligandos junto con los pares de electrones que comparten con el átomo central. Hay que tener presente que el estado de oxidación es un índice que resulta de aplicar unas reglas formales y simples¹⁸ y que no indica la

¹⁸ Véase secciones IR-4.6.1 e IR-5.4.2.2 en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book).

distribución de los electrones. Los siguientes ejemplos muestran la relación entre carga neta de una entidad de coordinación, el número y las cargas de los ligandos y el estado de oxidación calculado del átomo central.

Fórmula	Ligandos	Estado oxidación átomo central
1. $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_3(\text{OH}_2)_3]^{3+}$	6 NH_3 + 3 H_2O	III
2. $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{3+}$	5 NH_3 + 1 Cl^-	IV
3. $[\text{Co}(\text{CN})_5\text{H}]^{3-}$	5 CN^- + 1 H^-	III
4. $[\text{Mn}(\text{FO}_3)]$	3 O^{2-} + 1 F^-	VII
5. $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$	5 CO	0
6. $[\text{NiCl}_4]^{2-}$	4 Cl^-	II

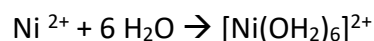
Nomenclatura de coordinación: una nomenclatura de adición

Cuando se desarrolló por primera vez la teoría de la coordinación, los compuestos de coordinación se nombraron tomando como base un principio de adición, mediante el cual, se combinaban el nombre del compuesto central y los de los compuestos añadidos. Este principio histórico sigue vigente como el fundamento para nombrar los compuestos de coordinación.

De la misma forma que la entidad de coordinación se construye alrededor del átomo central, el nombre de los compuestos de coordinación se construye en torno al nombre del átomo central.

Ejemplo:

1. Construcción de la entidad de coordinación: adición de ligandos a un átomo central:



2. Construcción del nombre: adición de nombres de ligandos al nombre del átomo central:

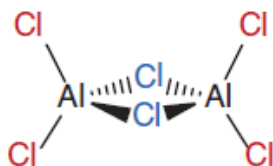
Ion hexaacuaniquel(II)

Cuando las estructuras sean más complicadas se nombrarán con más facilidad tratándolas como especies polinucleares.¹⁹

¹⁹ Véase sección IR-9.2.5 en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book)

Ligandos puente. Los ligandos puente son aquellos que están enlazados a más de un átomo central. Para diferenciarlos se utiliza el prefijo “μ” (del Griego *mu*), con el prefijo y el nombre del ligando puente separados por un guion uno de otro y del resto del nombre. Esto es suficiente si el ligando es monoatómico. Si el ligando puente es más complicado será necesario utilizar los términos “κ” (convenio kappa) para especificar qué átomo enlazante de cada ligando está unido al átomo central. Si el ligando tiene átomos de diferente tipo también éste será el caso.

Ejemplo:

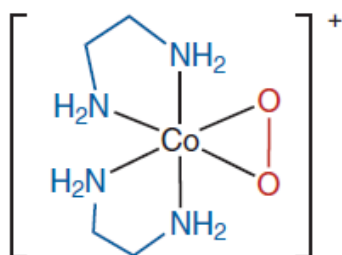


di-μ-cloruro-bis(dicloruroaluminio)

di-μ-cloruro-tetracloruro-1κ²Cl,2κ²Cl-dialuminio

Especificando la conectividad. Algunos ligandos se pueden enlazar al átomo central a través de diferentes átomos. Para especificar qué átomos son los implicados en el enlace, se añade el término “κ” al nombre del ligando, colocándose entre el nombre del ligando, y el átomo al que se hace referencia. En el caso de enlaces múltiples idénticos al átomo central se indica por la adición del **superíndice** numeral adecuado entre la “κ” y el símbolo del elemento. Por otra parte, si los átomos de un mismo ligando enlazan de forma contigua se utiliza el término “η”.

Ejemplo:



Átomo central: **Cobalto(III)**

Identificación y nombre de los ligandos: **etano-1,2-diamina, peróxido**

Especificando la conectividad: **etano-1,2-diamino- κ²N- η²-peroxido**

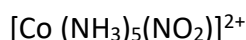
Nombre completo: **bis(etano-1,2-diamino- κ²N)-(η²-peroxido)cobalto(III)**

El término “κ” se usa también con ligandos en los que es posible más de un modo de coordinación. Casos típicos son el ligando tiocianato (SCN), que puede enlazar a través del átomo de azufre (tiocianato-κS), ó a través del átomo de nitrógeno (tiocianato-κN), y el

ligando nitrito que puede enlazar a través del átomo de nitrógeno (M-NO₂, nitrito- κN), o a través del átomo de oxígeno (M-ONO, nitrito- κO).

Para los dos nitrito complejos isómeros de cobalto se utilizan los nombres: Pentaamino(nitrito-κN)cobalto(2+) y Pentaamino(nitrito-κO)cobalto(2+).²⁰

Ejemplo:



Pentaamino(nitrito-κN)cobalto(2+), si enlaza como M-NO₂

Pentaamino(nitrito-κO)cobalto(2+), si enlaza como M-ONO

Enlace metal-metal. Las estructuras sencillas que contienen un enlace metal-metal se describen de manera sencilla mediante la nomenclatura de adición.²¹ En estos casos se utiliza el símbolo *kappa* (κ), que asume una nueva función, que consiste en especificar qué átomos ligantes se unen a qué átomo central. Para ello se asignan números a los átomos centrales (1 y 2 en el caso de los ejemplos). El superíndice numérico que llevan los símbolos *kappa*, indica el número de ligantes que se unen a cada metal. Cuando las estructuras son más complicadas por involucrar tres o más átomos centrales, se tratan como clústeres y se nombran de manera especial.²²

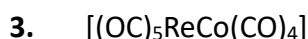
Ejemplos:



Bis(tetrabromurorenio)(Re-Re)(2+)



Octacloruro-1κ⁴Cl,2κ⁴Cl-direnato(2-)



Nonacarbonil-1κ⁵C,2κ⁴C-reniocobalto(Re-Co)

DESCRIPCIÓN DE LA CONSTITUCIÓN DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

Existen tres métodos para describir la constitución de los compuestos: se pueden dibujar sus estructuras, escribir sus nombres o escribir sus fórmulas. Las estructuras no son adecuadas para incluirlas en textos. El nombre suministra información detallada sobre sus componentes, pero es necesario seguir unas reglas para que se pueda interpretar sin

²⁰ Más ejemplos y posibilidades se discuten con mayor detalle en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book)

²¹ *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), pág. 163.

²² *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), secciones IR-9.2.5.6 e IR-9.2.5.7).

ambigüedad; estas reglas se detallarán a continuación y se ilustrarán con ejemplos adecuados. En el caso de que los nombres sean largos y complicados será muy útil utilizar las fórmulas, aunque hay que tener en cuenta que la fórmula de un compuesto por su forma abreviada no proporciona tanta información sobre su estructura como la que da el nombre.

NOMBRES DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

Los nombres sistemáticos de los compuestos de coordinación resultan de seguir los principios de la nomenclatura de adición referida con anterioridad (véase pág. 11). Así, en el nombre se tienen que identificar los grupos que rodean al átomo central. Éstos se citan como prefijos del nombre del átomo central junto con sus prefijos multiplicadores.

Para nombrar los compuestos de coordinación se emplean las siguientes reglas:

1. En la entidad de coordinación, los ligandos se nombran primero, seguidos por el ion metálico o átomo central. Los ligandos se nombran en orden alfabético.

Ejemplo:

$[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$; Cloruro de tetraaminocloruro**cobalto(II)**

2. A la hora de nombrar un compuesto de coordinación neutro, se hará de la misma forma que las sales inorgánicas: se nombra primero el anión, se añade “de” y a continuación se nombra el catión.

Ejemplo:

$[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$; Cloruro **de** tetraaminoclorurocobalto(III)

3. Los nombres de los ligandos aniónicos terminan con la letra -o. Los ligandos neutros se nombra generalmente como las moléculas. Las excepciones son en agua, el monóxido de carbono, el monóxido de nitrógeno y el amoníaco. Algunos ejemplos vienen recogidos en la siguiente tabla:²³

²³ Más ejemplos, incluidos ligandos biológicos, se encuentran en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), tabla VIII; pág. 270.

Tabla 23. Nombres IUPAC de ligandos frecuentes.

Ligandos	Fórmula	Nombre
neutros	H ₂ O	Acua
	NH ₃	Ammينو
	CO	Carbonil
	NO	Nitrosil
	O ₂	Dioxígeno
	N ₂	Dinitrógeno
	C ₅ H ₅ N	Piridina
	C ₅ H ₁₁ N	Piperidina
	MeNH ₂	Metanamina
	MePH ₂	Metilfosfano
	H ₂ NCH ₂ CH ₂ NH ₂	Etano-1,2-diamina (en)
aniónicos	H ⁻	Hidruro
	Cl ⁻	Cloruro
	I ⁻	Ioduro
	HO ⁻	Hidroxido
	CN ⁻	Cianuro
	CNMe ⁻	Isocianuro de metilo
	C ₂ O ₄ ²⁻	Oxalato
	CO ₃ ²⁻	Carbonato
	CH ₃ COO ⁻	Acetato
	Me ₂ As ⁻	Dimetilarsanuro
	MePH ⁻	Metilfosfanuro

4. Se desaconseja el uso de abreviaturas en los nombres.

Ejemplo: el ligando etano-1,2-diamina, H₂NCH₂CH₂NH₂, se puede abreviar como “en”, aunque la IUPAC desaconseja el uso habitual de abreviaturas.

[Co(en)₃]Cl₃; Tricloruro de tris(etano-1,2-diamina)cobalto(III)

5. Para indicar el número de cada tipo de ligandos en el nombre, se usan dos clases de prefijos multiplicadores:

- a) Los prefijos griegos *di-*, *tri-*, *tetra-*, etc. se utilizan para designar el número de cada tipo de ligando presente en el ion complejo.

Ejemplo: $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$; Cloruro de **tetraaminoclorurocobalto(III)**

- b) Si el nombre del ligando ya contiene un prefijo griego de este tipo (o es un ligando polidentado (como es el caso de la etano-1,2-**di**amina) , se usan en su lugar los prefijos *bis-*, *tris-*, *tetrakis-*, *pentakis-*, etc.

Ejemplo: $[\text{Co}(\text{en})_3]\text{Cl}_3$; Cloruro de **tris(etano-1,2-diamina)cobalto(III)**

6. Después de nombrar los ligandos se nombra el metal central. Si la entidad de coordinación es un catión, el metal se nombra lo mismo que el elemento. Si la entidad de coordinación es un anión, el nombre del metal termina en *-ato*.

Ejemplo: entidad de coordinación **catión**; $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$; cloruro de tetraaminocloruro**cobalto(III)**.

Ejemplo: entidad de coordinación **anión**; $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$; hexacianuro**ferrato(III)**.

7. Algunos ejemplos de nombres de metales en entidades aniónicas quedan recogidos en la siguiente tabla:

Tabla 24. Nombres de metales en entidades aniónicas

Nombre del metal	Nombre en una entidad aniónica
Hierro	Ferrato
Cobre	Cuprato
Plomo	Plumbato
Plata	Argentato
Oro	Aurato
Paladio	Paladato
Platino	Platinato
Molibdeno	Molibdato
Cromo	Cromato
Aluminio	Aluminato
Rutenio	Rutenato
Osmio	Osmato

8. A continuación del nombre del metal, el estado de oxidación del metal en la entidad de coordinación, se indica mediante un numeral romano entre paréntesis.

Ejemplo: $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$; Cloruro de tetraaminoclorurocobalto(**III**).

9. Alternativamente, puede indicarse la carga de una entidad de coordinación. La carga neta se escribe con números arábigos, precediendo el número al signo de la carga y encerrados entre paréntesis. Todo ello se escribe a continuación, y sin espacio, del nombre del átomo central, que incluye la terminación “-ato”, si procede.

Ejemplo: $K_2[OsCl_5N]$; pentacloruronitruroosmato(2-) de potasio

10. En el caso de que el complejo o entidad de coordinación sea neutra, se siguen las mismas reglas que para un complejo catiónico.

FÓRMULAS DE LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

Una fórmula (en línea) de un compuesto se usa para dar información básica sobre la constitución de un compuesto de forma concisa y útil.

1. En primer lugar se escribe el símbolo del átomo central

Ejemplo: Nos dicen que formulemos el compuesto Triaminotriacuacromo(III).

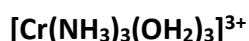
Primero escribimos el símbolo del átomo central,

Cr

A continuación se citan en orden alfabético los símbolos de los ligandos. Así, CH_3CN , $MeCN$, y NMe se ordenarían por las letras C, M, y N. Los símbolos de una letra anteceden siempre a los de dos letras con la misma inicial, así CO precede a Cl porque los símbolos de una letra, C, preceden a los de dos, Cl. Los símbolos de dos letras se ordenan alfabéticamente entre ellos, por ejemplo Br precedería a Cl. La colocación de los ligandos en la fórmula no depende de la carga del ligando.²⁴

Ejemplo: Nos dicen que formulemos el compuesto Triacuatriaminocromo(III).

Primero citamos el ligando NH_3 (letra N), después citamos el ligando OH_2 (letra O).



2. Las fórmulas en las que los ligandos se escriben con los átomos dadores más cercanos al átomo central proporcionan mayor información. Este procedimiento se recomienda siempre que sea posible.

Ejemplo: En el compuesto siguiente $[Cr(NH_3)_3(OH_2)_3]^{3+}$, el agua coordinada se escribe OH_2 en lugar de H_2O .

3. La fórmula de una entidad esté cargada o no, se encierra entre corchetes. Si los ligandos son poliatómicos, sus fórmulas se incluyen entre paréntesis, y las abreviaturas de los ligandos también entre paréntesis. Los corchetes se usan únicamente para encerrar las entidades de coordinación, mientras que los

1. ²⁴ Véanse secciones IR-9.2.3.1 e IR-4.4.2.2 en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book),

paréntesis y llaves se alojan de manera alternada.

Ejemplos:

El **corchete encierra la entidad de coordinación**, $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_3(\text{OH}_2)_3]^{3+}$

Los **paréntesis encierran las fórmulas de los ligandos**, (NH_3) , (OH_2)

Las **abreviaturas** de los ligandos **entre paréntesis**, $[\text{Co}(\text{en})]\text{Cl}_3$

Los **paréntesis y llaves** se alojan de manera **alternada**, $[\text{CuCl}_2\{\text{O}=\text{C}(\text{NH}_2)_2\}]$

4. Al escribir la fórmula de una entidad de coordinación cargada sin la del contraión, la carga se indicará por medio de un superíndice a la derecha y fuera del corchete, con el número delante del signo. El número de oxidación de un átomo central puede especificarse con número romano, colocándolo como superíndice a la derecha del símbolo del elemento.

Ejemplos:

La **carga de la entidad** se indica mediante un **superíndice a la derecha**, $[\text{PtCl}_6]^{2-}$

El **número de oxidación** del átomo central en **números romanos**, $[\text{Pt}^{\text{IV}}\text{Cl}_6]^{2-}$

Tabla 25. Formulas y Nombres de entidades de coordinación iónicas, entidades neutras y compuestos de coordinación o sales complejas:

	Nombre	Fórmula
Entidades catiónicas	Triacuatriaminocromo(III)	$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_3(\text{OH}_2)_3]^{3+}$
	Pentaaminocloruroplatino(IV)	$[\text{PtCl}(\text{NH}_3)_5]^{3+}$
	Diclorurobis(etilendiamina)platino(IV)	$[\text{PtCl}_2(\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2)_2]^{2+}$
Entidades neutras	Diaminotetracloruroplatino(IV)	$[\text{PtCl}_4(\text{NH}_3)_2]$
	Pentacarbonilhierro(0)	$[\text{Fe}(\text{CO})_5]$
	Diclorurobis(urea)cobre(II)	$[\text{CuCl}_2\{\text{O}=\text{C}(\text{NH}_2)_2\}]$
Entidades aniónicas	Hexacianuroferrato(II)	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$
	Tetracloruroniquelato(II)	$[\text{NiCl}_4]^{2-}$
Compuestos de coordinación (Sales Complejas)	Bromuro de triaminotriacuacromo(III)	$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_3(\text{OH}_2)_3]\text{Br}_3$
	Cloruro de hexaaminocobalto(II)	$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$
	Bromuro de pentaaminocloruroplatino(IV)	$[\text{PtCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Br}_3$
	Tetracloruropaladato(II) de potasio	$\text{K}_2[\text{PdCl}_4]$
	Hexacianuroferrato(II) de potasio	$\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$
	Tricloruro de tris(etano-1,2-diamina)cobalto(III)	$[\text{Co}(\text{en})_3]\text{Cl}_3$
	Tetracloruroniquelato(II) de calcio	$\text{Ca}[\text{NiCl}_4]$

Algunos ejemplos más:

- 1.- $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, hexacianuroferrato(II) de potasio, o hexacianuroferrato(4-) de potasio, o hexacianuroferrato de tetrapotasio.
- 2.- $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$, cloruro de pentaminoclorurocobalto(2+).
- 3.- $[\text{Co}(\text{en})_3]\text{Cl}_3$, Cloruro de tris(etano-1,2-diamina)cobalto(III).
- 4.- $\text{Na}[\text{PtBrCl}(\text{NH}_3)(\text{NO}_2)]$, aminobromurocloruronitrito-kN-platinato(1-) de sodio.
- 5.- $[\text{Fe}(\text{CNMe})_6]\text{Br}_2$, bromuro de hexakis(isocianuro de metilo)hierro(II).
- 6.- $[\text{CuCl}_2\{\text{O}=\text{C}(\text{NH}_2)_2\}_2]$, diclorurobis(urea)cobre(II)

DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN DE LAS ENTIDADES DE COORDINACIÓN

Una vez definida la composición de una entidad de coordinación, queda por describir las relaciones espaciales entre los componentes estructurales de la molécula o ion. Las moléculas que difieren solamente en la distribución espacial de los componentes estructurales se conocen como **estereoisómeros**. Los estereoisómeros que son imagen especular uno del otro se llaman **enantiómeros** (en ocasiones se les ha llamado también isómeros ópticos), mientras que los que no lo son se llaman **diastereoisómeros** (o isómeros geométricos). La descripción de la configuración de un compuesto de coordinación requiere considerar tres factores:

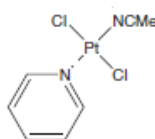
- La geometría de coordinación: identificación de la forma general de la molécula.
- La configuración relativa: descripción de las posiciones relativas de los componentes de la molécula en torno al átomo central en la geometría identificada. Distinción entre diastereoisómeros.
- La configuración absoluta: identificación de qué enantiómero se trata (si las imágenes no son superponibles).

DESCRIPCIÓN DE LA GEOMETRÍA DE COORDINACIÓN.

En todos los números de coordinación mayores que la unidad se pueden encontrar diferentes disposiciones geométricas de los átomos unidos al átomo central. Así las especies dicoordinadas pueden presentar disposición lineal ó angular de los ligandos respecto al átomo central. De la misma manera una especie tricoordinada, puede ser plana trigonal ó piramidal trigonal y una tetracoordinada, podría presentar geometrías plano-cuadrada, tetraédrica o piramidal de base cuadrada. El poliedro de coordinación (o polígono en las moléculas planas) puede indicarse en el nombre por medio de un afijo llamado **símbolo del poliedro**. Este descriptor distinguirá claramente a los isómeros que difieran en la geometría de sus poliedros de coordinación.

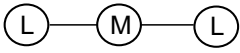
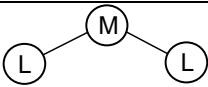
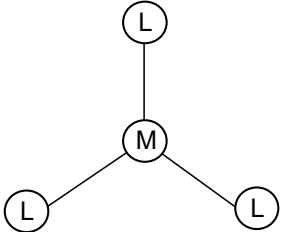
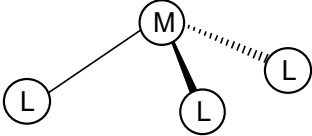
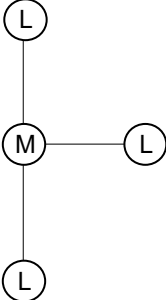
El símbolo del poliedro, indica la disposición de los átomos coordinados en torno al átomo central. Consta de **una o más letras mayúsculas en cursiva** que derivan de términos geométricos comunes que indican la geometría idealizada de los ligandos en torno al átomo central, y **un número arábigo** que es el número de coordinación del átomo central. El símbolo del poliedro se usa como afijo, encerrado entre paréntesis y separado del nombre por un guion.

Ejemplo: (SP-4)-(acetonitrilo)dicloruro(piridina)platino(II)



Las tablas siguientes²⁵ recogen los símbolos de los poliedros, las geometrías más comunes y sus correspondientes estructuras y/o poliedros.

Tabla 26. Símbolos de los poliedros, estructuras y/o poliedros. Número de coordinación 2, 3, 4, 5 y 6

Número de coordinación	Estructura	Símbolo
2	 Lineal	L-2
	 Angular	A-2
3	 Trigonal plana	TP-3
	 Pirámide trigonal	TPY-3
	 Forma en T	TS-3

²⁵ *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), secciones IR-9.2 e IR-9.

Tabla 27. Símbolos de los poliedros, estructuras y/o poliedros. Continuación.

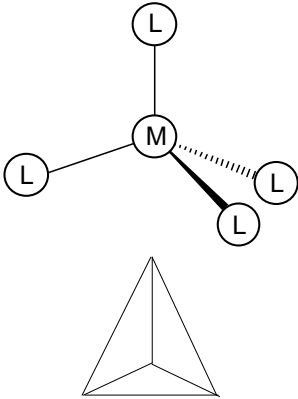
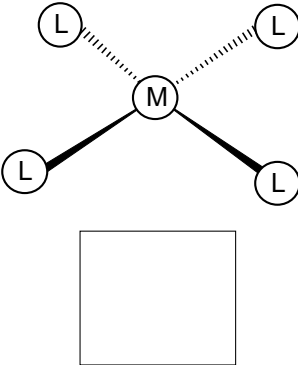
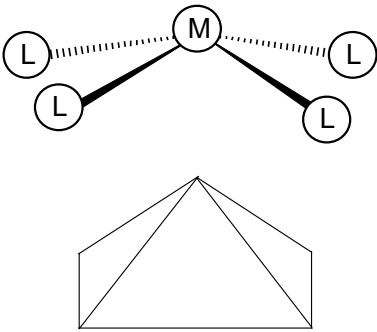
Número de coordinación	Estructura / Poliedro	Símbolo
4	 Tetraedro	<i>T-4</i>
	 Plano cuadrada	<i>SP-4</i>
	 Pirámide cuadrada	<i>SPY-4</i>

Tabla 28. Símbolos de los poliedros, estructuras y/o poliedros. Continuación.

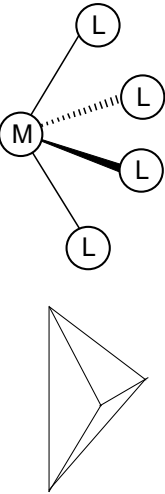
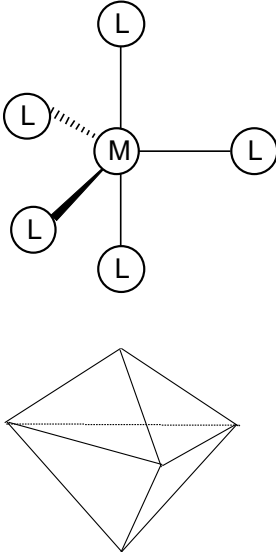
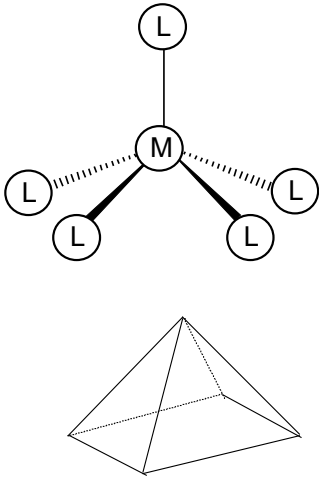
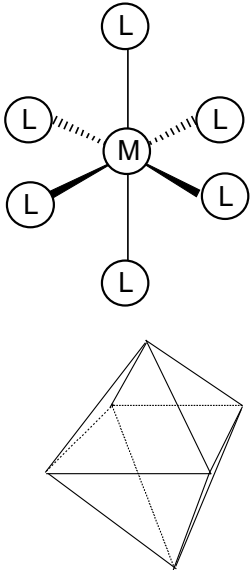
Número de coordinación	Estructura / Poliedro	Símbolo
4	 Balancín	SS-4
5	 Bipirámide trigonal	TBPY-5

Tabla 29. Símbolos de los poliedros, estructuras y/o poliedros. Continuación.

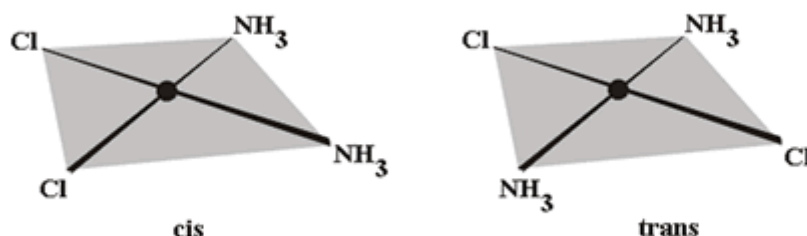
Número de coordinación	Estructura / Poliedro	Símbolo
5	 Pirámide cuadrada	SP-5
6	 Octaedro	OC-6

DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN. DISTINCIÓN ENTRE DIASTEREISÓMEROS.

Para identificar un determinado diastereoisómero existen varios términos comunes que siguen en uso y que generalmente se usan en el caso de geometrías plano-cuadradas u octaédricas, cuando hay únicamente dos tipos de átomos dadores (o ligandos), $[Ma_2b_2]$ (plano-cuadrado) o $[Ma_3b_3]$ (octaédrico). Sin embargo esa terminología no es la adecuada en otros muchos casos, en los que hay más de dos tipos de ligandos en torno al átomo central, como veremos a continuación.

Sistemas con coordinación plano-cuadrada (SP-4)

En el caso de complejo de coordinación plano-cuadrado $[M(NH_3)_2Cl_2]$, los átomos dadores idénticos ocupan posiciones de coordinación adyacentes en el isómero cis, y posiciones de coordinación opuestas en el isómero trans.



Sin embargo la terminología cis-trans no es la adecuada para distinguir entre los tres isómeros en una entidad plano-cuadrada $[Mabcd]$. Es evidente que se necesita otro método para distinguir este tipo de diastereoisómeros. Con este fin se ha desarrollado el “índice de configuración” que facilita las posiciones que ocupan en el poliedro de coordinación los átomos dadores (o ligandos). A cada átomo dador se le asigna un número de prioridad basándose dicho número en las reglas desarrolladas por Cahn, Ingold y Prelog²⁶, conocidas como “Reglas CIP”. Estos números de prioridad se utilizan después para formar el “índice de configuración”²⁷.

Reglas CIP

Método para deducir los números de prioridad en un conjunto de átomos dadores.

Como norma general, **los átomos dadores con número atómico más alto, son los de mayor prioridad.**

²⁶ *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), referencia 13.

²⁷ *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), sección IR-9.3.5.

La esencia de la regla es que los ligandos unidos al átomo central se comparan uno a uno, primero tomando como base el número atómico (si es solo un átomo) y después la masa atómica.

Una vez que se han comparado los ligandos se asignan los números de prioridad como sigue:

- Se le asigna la misma prioridad a ligandos idénticos.
- Al ligando o ligandos de prioridad más alta se le asigna el número de prioridad 1, a los siguientes en mayor prioridad 2, y así sucesivamente.

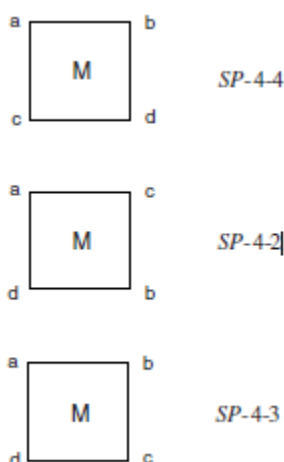
El índice de configuración de un sistema plano-cuadrado se coloca después del símbolo del poliedro (*SP-4*). Es el único dígito que corresponde al número de prioridad del átomo ligante en trans al átomo ligante de prioridad 1 (es decir, el número de prioridad del átomo ligante en trans al átomo ligante preferente)

Ejemplo: para una entidad plano-cuadrada [Mabcd].

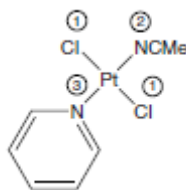
Suponiendo que los cuatro ligandos a, b, c, d tengan una secuencia de prioridad $a > b > c > d$; la secuencia de los números de prioridad asignados será: $1 < 2 < 3 < 4$

Para los tres siguientes hipotéticos diastereoisómeros **los índices de configuración** serán

En el primero de ellos, 4, por ser el ligando d (con número de prioridad 4, el que se encuentra en posición trans respecto al ligando de mayor prioridad, el a; y así sucesivamente)



Ejemplo: La secuencia de prioridad de los ligandos en el siguiente complejo de coordinación es: **1**, Cl; **1**, Cl; **2**, acetonitrilo; **3**, piridina.

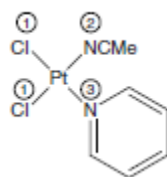


El índice de coordinación sería **1**, por estar en posición trans el ligando Cl (número de prioridad 1), respecto del ligando de prioridad, que es el Cl (número de prioridad 1).

Se nombraría como: **(SP-4-1)**-(acetonitrilo)dicloruro(piridina)platino(II)

Ejemplo: La secuencia de prioridad en el siguiente complejo es idéntica a la anterior (se trata de un diastereoisómero del compuesto anterior).

En este caso el índice de coordinación sería **3**, por estar en posición trans el ligando piridina (número de prioridad 3) respecto del ligando de más prioridad que es el ligando Cl.

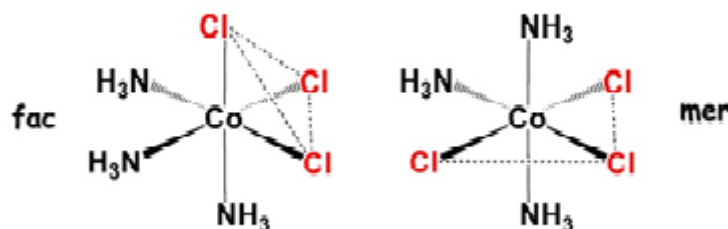


Se nombraría por tanto: **(SP-4-3)**-(acetonitrilo)dicloruro(piridina)platino(II)

Sistemas con coordinación octaédrica (OC-6)

Para distinguir los isómeros de la forma $[Ma_3b_3]$, generalmente se utilizan los términos mer(meridional) y fac(facial), aunque el término “índice de coordinación”, como veremos más abajo es sumamente útil para identificar que ligandos (o átomos dadores) ocupan posiciones de coordinación particulares.

Ejemplo: En el compuesto $[Co(Cl)_3(NH_3)_3]$ los dos isómeros se distinguen utilizando los términos mer y fac como sigue:



En el isómero fac cada uno de los dos grupos de tres átomos dadores similares ocupa

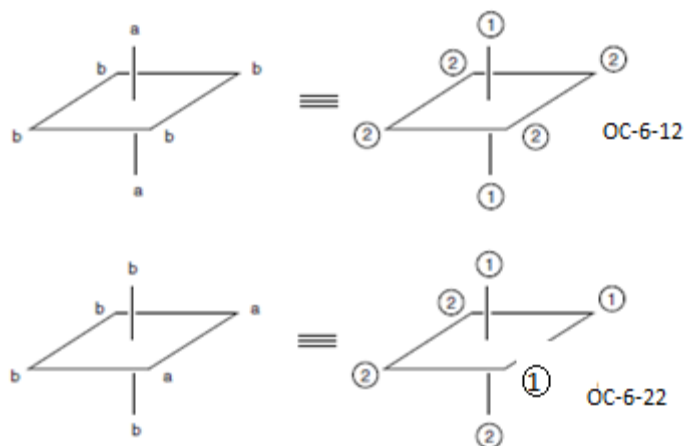
posiciones de coordinación en los vértices de una cara del octaedro. En el isómero *mer*, cada uno de los dos grupos de tres átomos dadores similares, se encuentra en un meridiano del octaedro de coordinación y en un plano que contiene el átomo central.

“El índice de coordinación” de un sistema octaédrico sigue al símbolo del poliedro (OC-6) y consta de dos dígitos.

El primer dígito: es el número de prioridad del átomo ligante en posición trans respecto al átomo ligante de número de prioridad 1

Los dos átomos ligantes, el de prioridad 1 y el de más baja prioridad trans a él, definen el **eje de referencia** del octaedro.

El segundo dígito: es el número de prioridad del átomo ligante en posición trans respecto al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia.



OC-6-12:

Primer dígito: 1, número de prioridad del ligante trans al átomo ligante de número de prioridad 1 (a). Este primer dígito hace referencia al eje principal, que es el vertical. Es 1 porque es el mismo ligando en los dos casos, el de más prioridad.

Segundo dígito: 2, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia. Este segundo dígito hace referencia al plano perpendicular al eje principal (que es el vertical).

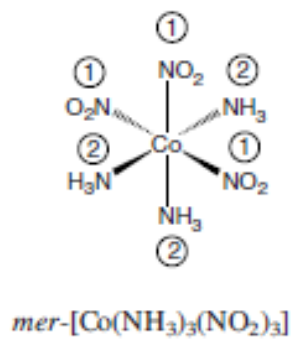
OC-6-22:

Primer dígito: 2, número de prioridad del ligante trans (a) al átomo ligante de número de prioridad 1 (a). Es 2 porque está en trans al ligando preferente el ligando con

orden de prioridad 2.

Segundo dígito: 2, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia.

Ejemplo:



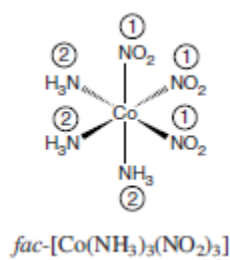
(OC-6-21)-triaminotrinitrito- k^3N -cobalto(III)

OC-6-21:

Primer dígito: 2, número de prioridad del ligante trans al átomo ligante de número de prioridad 1.

Segundo dígito: 1, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia.

Ejemplo:

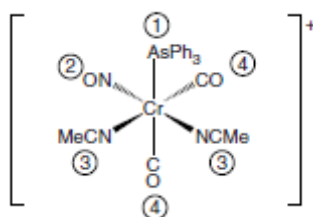


(OC-6-22)-triaminotrinitrito- k^3N -cobalto(III)

OC-6-22:

Primer dígito: 2, número de prioridad del ligante trans (a) al átomo ligante de número de prioridad 1.

Segundo dígito: 2, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia.

Ejemplo:

(OC-6-43)-bis(acetonitrilo)dicarbonil nitrosil(trifenilarsano)cromo(1+)

(OC-6-43):

Primer dígito: 4, número de prioridad del ligante trans (CO) al átomo ligante de número de prioridad 1 (el de más peso molecular AsPh₃).

Segundo dígito: 3, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia.

Para obtener más información sobre los dos sistemas anteriores, o sobre los índices de coordinación en sistemas con otras coordinaciones como piramidal cuadrada, bipiramidal, forma de T, forma de balancín etc. consultar sección IR-9.3.3, libro rojo.

DESCRIPCIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA: DISTINCIÓN ENTRE ENANTIÓMEROS:

Existen dos sistemas diferentes, ya establecidos con anterioridad, para distinguir entre enantiómeros (estereoisómeros que son imágenes especulares uno del otro).

El primero: se basa en la constitución química del compuesto e incluye el convenio **R/S**, para describir centros tetraédricos, y el convenio **C/A**, muy relacionado con el anterior, usado para otros poliedros. Ambos convenios usan la secuencia de prioridad vista anteriormente (asignando número de prioridad en base al número atómico).

El segundo: hace uso de la geometría de la molécula y hace uso del convenio de las rectas oblicuas (IR-9.3.4.11) generalmente aplicable únicamente a compuestos octaédricos y a complejos quelato.

A continuación, y a modo de ejemplo, se verán los convenios más básicos y útiles aplicables a los complejos de coordinación, para más información consultar la sección IR.9.4.4.1 en *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book)

Convenio R/S para centros tetraédricos

Aunque este convenio se desarrolló inicialmente para átomos de carbono, puede utilizarse para cualquier centro tetraédrico.

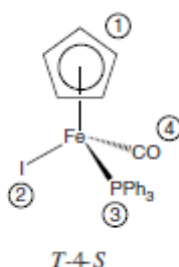
Se asigna el símbolo R si la secuencia cíclica de los números de prioridad, comenzando por el de mayor prioridad, sigue el sentido horario, cuando el observador mira a lo largo del vector que va desde el centro del tetraedro hasta el sustituyente de menor prioridad (en el ejemplo siguiente el sustituyente de menor prioridad sería el 4, y formaría un vector con el centro, M, del tetraedro). Si la secuencia tiene sentido antihorario, se le asigna el símbolo S.

Ejemplo:



Este convenio también es muy útil para complejos organometálicos.

Ejemplo:

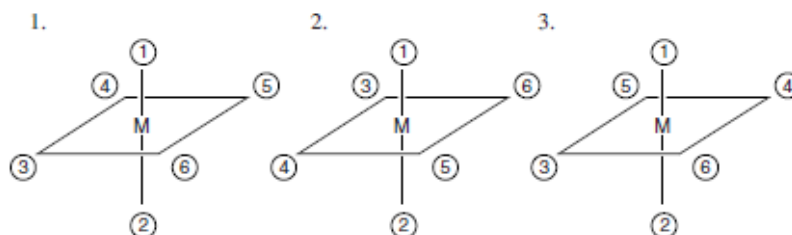
**Convenio C/A para centros octaédricos**

Este sistema es de los más generales y puede usarse para todo tipo de complejos octaédricos.

En primer lugar, se define el eje de referencia, que es aquel que contiene el átomo ligante de máxima prioridad (CPI 1) y el átomo ligante trans de prioridad más baja (mayor valor numérico).

Los átomos en el plano perpendicular al eje de referencia se miran desde el átomo ligante que tiene la prioridad más alta (menor número). Si la dirección para ir desde el átomo ligante con mayor prioridad de este plano al siguiente átomo ligante es horaria, el símbolo de quiralidad es C y si es antihorario es A.²⁸

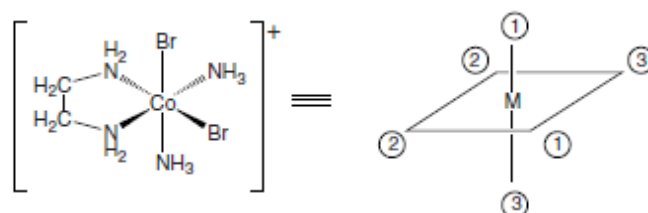
²⁸ *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 2005* (IUPAC Red Book), sección IR-9.3.4.8.



- 1. Símbolo de quiralidad = C
- 2. Símbolo de quiralidad = A
- 3. Símbolo de quiralidad = C

Ejemplo:

El compuesto siguiente, $[\text{CoBr}_2(\text{en})(\text{NH}_3)_2]^+$, tiene:

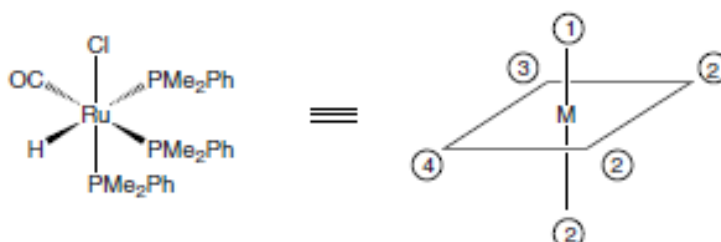


- Como símbolo de poliedro **OC-6**
- Como índice de configuración **32** (**Primer dígito: 3**, número de prioridad del ligante trans (a) al átomo ligante de número de prioridad 1; **Segundo dígito: 2**, número de prioridad del átomo ligante en posición trans al ligando más preferente en el plano perpendicular al eje de referencia).

Como símbolo quiral **C** (desde el átomo de más prioridad, 1, del plano perpendicular al eje de referencia, los números de prioridad siguen la secuencia horaria)

Ejemplo:

En el compuesto, $[\text{Ru}(\text{CO})\text{ClH}(\text{PMe}_2\text{Ph})_3]$,



- El símbolo del poliedro es OC-6
- El índice de configuración es 24
- El símbolo quiral es A

BIBLIOGRAFÍA

- N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, Alan T. Hutton (Eds.); *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 2005*. Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, ISBN 0-85404-438-8 (Red Book).
- R. Petrucci y col; *Química General, Principios y aplicaciones modernas*, 11ª edición, Pearson, 2017.
- G. J. Leigh (Ed.); *Principles of Chemical Nomenclature, A Guide to IUPAC Recommendations*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., 2011, ISBN 978-1-84973-007-5.
- R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 5, 385-425, 1966.
- V. Prelog, G. Helmech, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 21, 567-583, 1982.
- S. Olivares, *Nomenclatura de química inorgánica. Recomendaciones de la IUPAC de 2005. Una adaptación del Libro Rojo a bachillerato*, Murcia, 2011. Disponible en: bit.ly/268k7hw.
- W. R. Peterson; *Nomenclatura de las Sustancias Químicas*, 4ª edición, 2013, Ed. Reverté, Barcelona, ISBN: 978-8-42917-608-7.
- R. M. Hartshorn, E. Hey-Hawkins, R. Kalio, G. J. Leigh; *Pure Appl. Chem.*, 79, (10), 1779–1799, 2007, doi: 10.1351.
- H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.); *Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*. Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, ISBN 978-0-85404-182-4 (Blue Book).
- R. Panico, W. H. Powell; *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds. Recommendations 1993*, Blackwell Science, 1993.
- E. Quiñoá Cabana, R. Riguera Vega; *Nomenclatura y Representación de los Compuestos Orgánicos. Una guía de estudio y autoevaluación*. 2ª edición, 2005, Mc Graw Hill, Madrid. ISBN: 84-481-4363-9.
- *Indicaciones sobre el uso de la Nomenclatura de Química Orgánica*. Ponencia de Química de Andalucía, 2014.
https://www.upo.es/ponencia_quimica/export/sites/ponencia_quimica/Descargas/guia_nomenclaturaorganica_2014x1x.pdf
- <http://www.iupac.org/publications/pac/>
- <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>