

I-11 HIDRUROS DE BORO Y COMPUESTOS RELACIONADOS

CONTENIDO

- I-11.1 Introducción
- I-11.2 Nomenclatura de los hidruros de boro
 - I-11.2.1 Aspectos de las estructuras de los hidruros de boro que requieren una consideración especial
 - I-11.2.2 Bases de la nomenclatura de los hidruros de boro
- I-11.3 Clústeres (cúmulos) de hidruros de poliboro poliédricos
 - I-11.3.1 Clasificación y nombres de clases
 - I-11.3.1.1 Relaciones estructurales en los cúmulos (clústeres) de hidruros de poliboro más sencillos
 - I-11.3.1.2 Clases estructurales más complejas
 - I-11.3.2 Nombres de los hidruros de boro individuales
 - I-11.3.2.1 Nombres estequiométricos
 - I-11.3.2.2 Nombres con descriptores estructurales (generalidades)
 - I-11.3.2.3 Numeración sistemática de los cúmulos (clústeres) poliédricos
 - I-11.3.2.4 Nombres sistemáticos para la distribución de los átomos de hidrógeno
 - I-11.3.2.5 Indicadores estéricos *endo-* y *exo-*
 - I-11.3.2.6 Isómeros estructurales
 - I-11.3.2.7 El método "desbor" para nombrar cúmulos (clústeres) de poliboro abiertos
- I-11.4 Sustitución y reemplazo en los clústeres (cúmulos) de boro
 - I-11.4.1 Sustitución de hidrógenos
 - I-11.4.2 Formación de aductos
 - I-11.4.3 Reemplazo en el esqueleto (subrogación)
 - I-11.4.3.1 Generalidades
 - I-11.4.3.2 Carbaboranos
 - I-11.4.3.3 Metalaboranos y metalacarbaboranos
 - I-11.4.3.4 Compuestos organobóricos
- I-11.5 Nombres de los iones
 - I-11.5.1 Aniones
 - I-11.5.2 Cationes
 - I-11.5.3 Estructuras con centros aniónicos y catiónicos (*zwitteriones*)
- I-11.6 Nombres de los radicales (grupos sustituyentes)
- I-11.7 Observaciones finales

I-11.1 INTRODUCCIÓN

Los compuestos de boro, a veces llamados “deficientes en electrones”, incluyen estructuras que no pueden manejarse con ninguno de los conceptos y procedimientos clásicos de la nomenclatura orgánica o inorgánica, basados en suposiciones respecto de la localización de los electrones de valencia. El término “deficiente en electrones”, implica que hay otros compuestos de boro con los “electrones justos” que son, en cierto modo, más normales. Sin embargo, ya que ambos tipos de compuestos tienen orbitales moleculares enlazantes que están correctamente llenos en todos los casos, se recomienda que ese uso se reemplace por “cúmulos o clústeres de boro” o “hidruros de poliboro”, según convenga.

La nomenclatura de los hidruros de boro poliédricos (boranos) y compuestos relacionados, ha presentado muchos problemas debido a las variaciones observadas en los esquemas de enlaces, sustituciones y conectividad. La comprensión de estos cúmulos ha permitido racionalizar la química de muchos compuestos inorgánicos, organometálicos y otros clústeres de metales de transición descritos recientemente, aunque no hay todavía una nomenclatura común y aceptada que cubra estas áreas de la química. La que se presenta aquí está limitada a los sistemas más sencillos, de simetría relativamente alta; la discusión de sistemas más complejos se reserva para una publicación posterior.

Para los oxoácidos del boro, boruros metálicos y compuestos de coordinación del boro, véanse los Capítulos I-9, I-5 y I-10, respectivamente.

I-11.2 NOMENCLATURA DE LOS HIDRUROS DE BORO

I-11.2.1 Aspectos de las estructuras de los hidruros de boro que requieren una consideración especial

Las características de las estructuras de los hidruros polibóricos que se enumeran a continuación contribuyen a la complejidad del problema de esta nomenclatura.

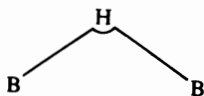
(i) Conectividad: para muchos elementos no metálicos, los enlaces con los átomos vecinos más cercanos puede racionalizarse mediante enlaces por pares de electrones pero, para los hidruros de poliboro en clústeres, cada átomo de boro puede contribuir con un máximo de 3 electrones a sus vecinos más cercanos, que pueden ser hasta 5, 6 y ocasionalmente 7. Por tanto, las conexiones no pueden considerarse como enlaces sencillos por un par de electrones y las estructuras de muchos compuestos del boro no pueden dibujarse con trazos rectos entre átomos, para representar pares de electrones, incluso aunque el enlace correspondiente pueda ser fuertemente direccional.

(ii) Asociación triangular de los átomos de boro: en muchas estructuras de boranos, los clústeres aparecen en forma de agregados de triángulos, que dan lugar a poliedros de caras triangulares interconectadas. Un icosaedro regular, que presenta la mayor simetría observada en la práctica, tiene 20 caras triangulares equiláteras, 12 vértices y 30 aristas que conectan los átomos de los vértices. Casi todas las estructuras tienen esqueletos de átomos de boro que pueden considerarse como fragmentos de un icosaedro o de otro poliedro (cerrado) de caras triangulares.

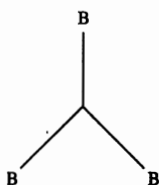
(iii) Puentes de hidrógeno: las estructuras poliédricas que son fragmentos de poliedros mayores suelen tener pares de átomos de boro unidos por un átomo de hidrógeno en forma de puente, a través de enlaces tricéntricos de dos electrones.

(iv) Enlaces tricéntricos entre átomos de boro: el enlace de las estructuras poliédricas con caras triangulares equiláteras, a menudo puede racionalizarse mediante enlaces tricéntricos de dos electrones entre algunos de los átomos de boro.

Las representaciones usadas comúnmente para los conjuntos indicados en (iii) y (iv) se muestran a continuación:

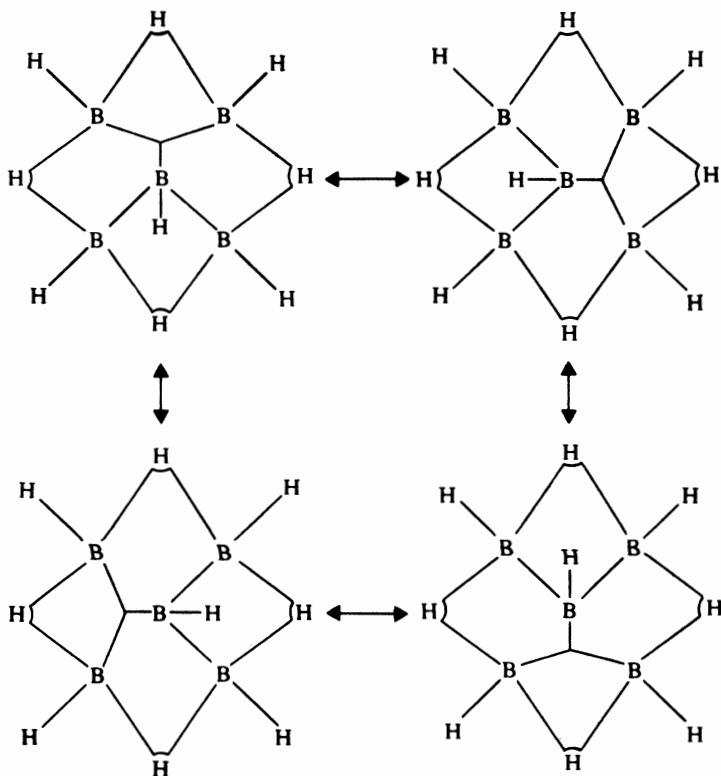


representa un puente de hidrógeno.



representa un enlace tricéntrico entre átomos de boro.

Excepto para los hidruros de poliboro más sencillos, pueden dibujarse varias formas canónicas que implican deslocalización electrónica (como el benceno). Por ejemplo, el enlace en la estructura geométrica del B_5H_5 , (véase la Sección I-11.3.2.2, ejemplo 9) puede representarse en su proyección plana por las cuatro formas canónicas siguientes:



(v) Unión de fragmentos poliédricos: ésta puede incluir uniones por un enlace entre átomos de boro, o la compartición de elementos poliédricos comunes, tales como un vértice, arista, cara o sistema de caras. Los clústeres de hidruros de poliboro con tales características se han denominado como “*conjuncto-boranos*” S.N. Boocock, N.N. Greenwood, J.D. Kennedy, W.S. McDonald y J. Staves, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 790 (1980) .

(vi) Reemplazo en el esqueleto (subrogación): los átomos de boro del esqueleto poliédrico (junto con cualquier átomo de hidrógeno unido a aquellos), pueden ser reemplazados por muchos otros elementos, incluyendo átomos metálicos que pueden llevar ligandos.

I-11.2.2 Bases de la nomenclatura de los hidruros de boro

Los hidruros del boro son más numerosos que los de cualquier otro elemento, excepto el carbono, y su nomenclatura puede abordarse desde distintos puntos de vista, algunos de los cuales se presentan seguidamente.

(i) Una nomenclatura estequiométrica, que se basa en la usada para los hidrocarburos y para los compuestos de coordinación. La principal diferencia entre este sistema y el de la nomenclatura de los hidrocarburos, consiste en que debe indicarse el número de átomos de hidrógeno; éste no puede deducirse de simples consideraciones de enlaces.

ii) Una nomenclatura basada en indicadores estructurales, que puede subdividirse en: (a) un estilo semisistemático, que trata de lograr una adecuada diferenciación por medio de prefijos estructurales característicos (*closo*, *aracno*-, etc.); (b) un estilo sustractivo, basado en la remoción formal de átomos del esqueleto (de clústeres de poliedros triangulares de átomos de boro); cuando éstos son neutros se toman sus nombres como referencia, al estilo de la nomenclatura orgánica; cuando están en forma de iones, los nombres siguen el estilo de la nomenclatura de coordinación. Estos métodos se detallan en la Sección I-11.3.2, donde se tratan sólo ejemplos directos. De la misma forma que se describieron los silanos y fosfanos (Capítulo I-7) como derivados sustituidos de un conjunto de hidruros precursores, se puede usar ahora una serie de hidruros de boro ya sean neutros o iónicos, y aun hipotéticos, como base para nombrar todo un conjunto de derivados sustituidos.

La química del boro se extiende a estructuras moleculares de mayor complejidad incluso, y los casos más complicados se tratarán en una publicación posterior (Nota 11a).

I-11.3 CLÚSTERES (CÚMULOS) DE HIDRUROS DE POLIBORO POLIÉDRICOS

I-11.3.1 Clasificación y nombres de clases

I-11.3.1.1 *Relaciones estructurales en los cúmulos (clústeres) de hidruros de poliboro más sencillos.*

Muchas de las especies descritas bajo este título son compuestos termodinámicamente estables, pero algunos se conocen sólo en disolución y otros son todavía hipotéticos, o sólo conocidos como derivados sustituidos. Sin embargo, es necesario darles nombre a todos y el considerar una determinada estructura molecular en este Capítulo no implica necesariamente que haya sido caracterizada.

Nota 11a. La propuesta de R. M. Adams [*Paper* 29, presentado en la reunión IMEBORON IV, Salt Lake City (Utah, EE. UU.), en julio de 1979], de basar la nomenclatura de los cúmulos inorgánicos de boro en la descripción deltaédrica de un esqueleto poliédrico *closo*-, no ha tenido gran aceptación y, más recientemente, se hicieron otras propuestas para esta área de la nomenclatura. [J.B. Casey, W.J. Evans y W.H. Powell, *Inorg.Chem.*, **20**, 1333 (1981); **22**, 2228 (1983); **22**, 2236 (1983); **23**, 4132 (1984); R.W. Rudolph, *Acc. Chem. Res.*, **9**, 446 (1974)].

Es conveniente y apropiado basar la nomenclatura de los compuestos poliédricos de hidruros de poliboro más sencillos en la consideración de poliedros de caras triangulares (deltaedros), en los que los átomos de boro ocupan todos los vértices. Cada átomo de boro tiene unido un átomo de hidrógeno y las estructuras de una serie de poliedros cerrados $(B_nH_n)^{2-}$ aparecen en la primera columna de la Tabla I-11.1. Éstas se conocen como estructuras *closo*-, por corrupción de “*clovo*” derivado de “*clovis*” (en latín, *clovis*, caja; en griego *κλωβος*).

Toda serie de hidruros de boro neutros puede considerarse relacionada estructuralmente con estos dianiones *closo* $(B_nH_n)^{2-}$, por remoción formal de un vértice BH de máxima conectividad (véase la Sección I-11.2.1) y adición de dos hidruros (véase la Sección I-3.5.2) más otros dos átomos de hidrógeno; se genera así una serie de hidruros de poliboro neutros, de fórmula general B_nH_{n+4} , en los que algunos átomos de hidrógeno están unidos a un solo átomo de boro y otros átomos de hidrógeno ocupan posiciones puente entre dos átomos de boro adyacentes. Los miembros de esta serie se conocen como *nido*-boranos (del latín *nidus*, nido) (véase la Sección I-11.3.2.2, ejemplo 9) (Nota 11b). Los *nido*-boranos neutros pueden perder un hidrón formando los monoaniones que también figuran en la Tabla I-11.1. La sustitución de átomos de boro del esqueleto por átomos de carbono, con el consiguiente reajuste del número de átomos de hidrógeno, da una serie de carbaboranos con la fórmula general indicada (véase la Sección I-11.4.3.2, ejemplo 3).

Otra serie de hidruros de boro neutros, se halla relacionada estructuralmente, en forma similar, con los *closo*-aniones, por la remoción formal de un vértice BH de máxima conectividad (lo que originaría una estructura *nido*-) y uno de los vértices BH adyacentes. La adición de dos hidruros y de cuatro átomos de hidrógeno da una serie de hidruros de poliboro, de fórmula general B_nH_{n+6} . Los miembros de esta serie se conocen como *aracno*-boranos (del griego *αραχνη*, telaraña) (Tabla I-11.1) (véase la Sección I-11.3.2.2, ejemplo 10).

La extensión de este tipo de proceso sustractivo, genera los *hifo*-boranos (del griego *υφειν*, tejer), de fórmula general B_nH_{n+8} , en los que los átomos de boro ocupan n vértices de un poliedro *closo* de $n+3$ vértices, y los *klado*-boranos (del griego *κλαδος*, rama), de fórmula general B_nH_{n+10} , donde están ocupados n vértices de un poliedro *closo* de $n+4$ vértices. Sólo se han identificado como derivados miembros de las series *hifo* y *klado*.

Las relaciones estructurales de todos los tipos arriba mencionados se resumen en la Tabla I-11.2. Para todos estos tipos, la fórmula general está sometida a la siguiente restricción:

$$(\text{número de átomos de hidrógeno/número de átomos de boro}) \leq 3$$

I-11.3.1.2 Clases estructurales más complejas

Además de las estructuras de hidruros de poliboro antes descritas, pueden existir otras. Por ejemplo, cualquier cara triangular de un sistema poliédrico de boros puede estar “apicada”, lo que significa que un átomo adicional se incorpora al esqueleto de forma que se asocia directamente con los tres átomos de una cara externa, dando un vértice extra. Esto ocurre frecuentemente en los clústeres de hidruros de metaloboro. Los ejemplos 1 y 2 de la pág. 214 ilustran la topología de este tipo de compuestos, pero su nomenclatura no se considera en este Capítulo.

Nota 11b. El prefijo *nido*- se ha usado para referirse a otros hidruros polibóricos de estructuras abiertas (que tienen caras no triangulares), pero este uso no se recomienda.

Tabla I-11 # Resumen de los tipos estructurales poliédricos, relacionados con la estequiometría y el recuento de electrones. Las flechas (pequeñas) indican los ejes de rotación principales.

<i>n</i>	Número de Vértices	Closo (cerrados)	Nido	Aracno
		$(B_nH_n)_2^{2-}$	$B_nH_{n+4} (B_nH_{n+3})^-$	$B_nH_{n+6} (B_nH_{n+5})^-$
4				
5				
6				
7				
8				

* La numeración es la tradicional y no sistemática.

♦ La estructura representada del $nido-B_9H_{12}$ difiere de la real, que es más abierta (Sección I-11.3.2.2 y Nota 11e), y se numera tradicionalmente en el sistema *aracno*.

♦♦ La numeración usual del $nido-B_{10}H_{14}$ que se indica aquí está basada en realidad en el sistema *aracno* (Sección I-11.3.2.3 y Nota 11h).

Este material deriva del trabajo inicial de R.E. Williams, *Inorg. Chem.*, **10**, 210 (1971) y la Tabla de R.W. Rudolph y W.R. Pretzer, *Inorg. Chem.*, **11**, 1974 (1972). Se han omitido todos los átomos de hidrógeno para mayor claridad. Las flechas diagonales entre las columnas indican series de estructuras *closo*, *nido* y *aracno* relacionadas. En general, la remoción del vértice de mayor conectividad de un esqueleto *closo* genera la correspondiente estructura *nido*. La estructura *aracno* relacionada se origina por remoción del vértice de mayor conectividad (o de uno de ellos, si hay más de uno) en la cara abierta de la estructura *nido*.

La mayoría de estas estructuras han sido identificadas. Algunas otras, sin embargo, no lo están y otras han sido idealizadas. Por ejemplo, la estructura identificada del B_9H_{12} no sigue el principio de transformación *closo-nido-aracno*, y es más abierta (*aracnoide*). Hay dos isómeros del B_9H_{12} y sólo uno de ellos cumple con este principio. Se han observado otras desviaciones, p. ej. con los metalaboranos que tienen estructuras derivadas por eliminación de vértices BH que no son de máxima conectividad. Éstas se tratarán en una publicación posterior.

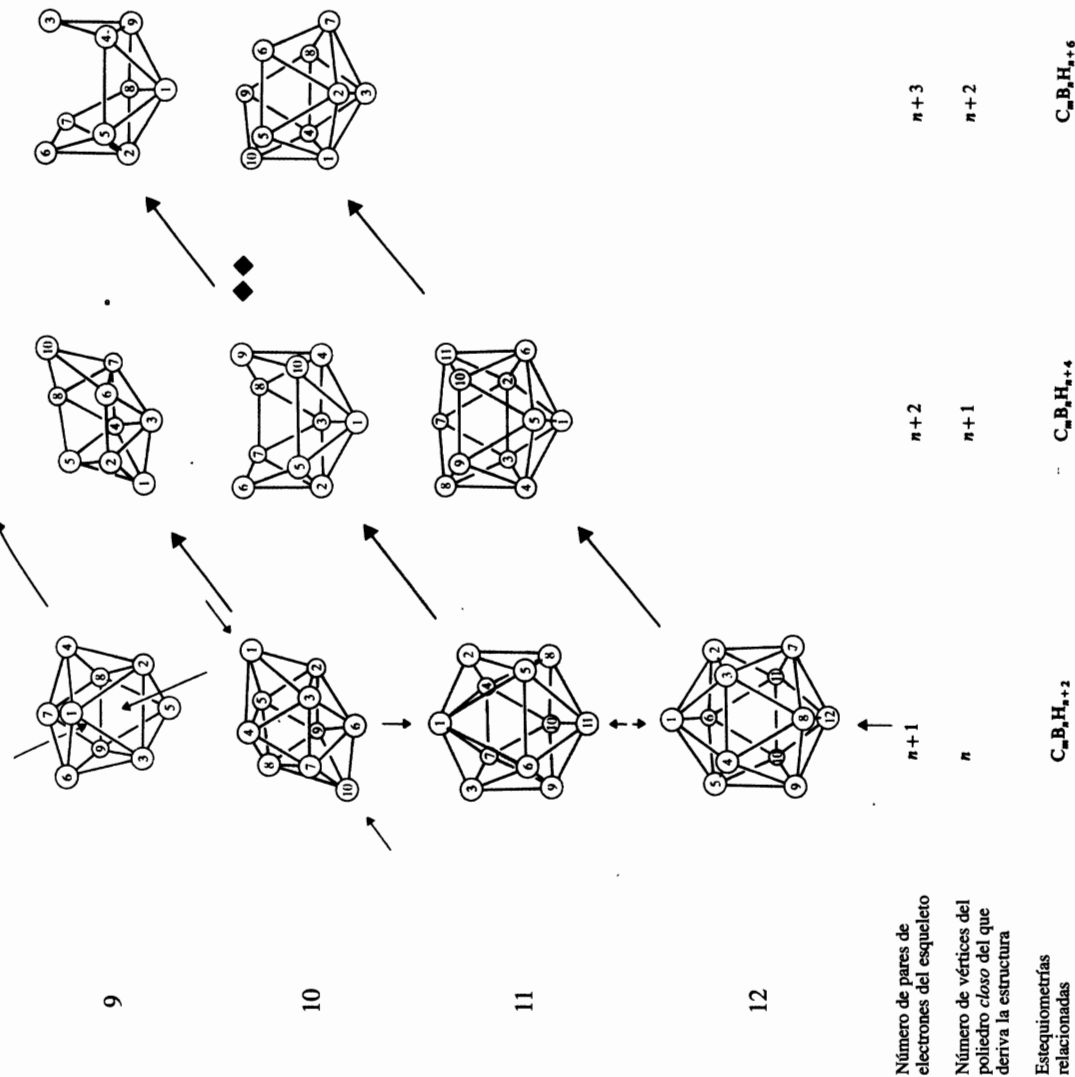
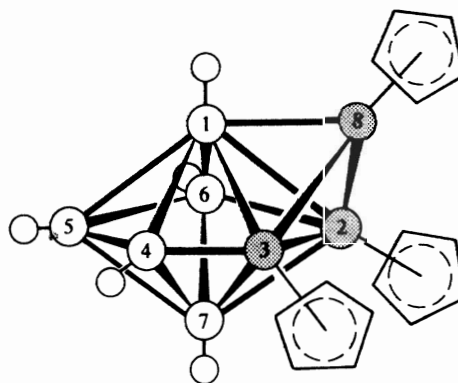
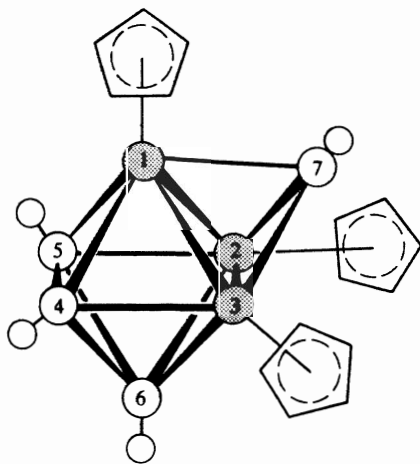


Tabla I-11.2 Resumen de los tipos estructurales de los hidruros de boro poliédricos, según las relaciones de estequiometría y de recuento de electrones ^a

<i>closo</i>	Estructuras poliédricas cerradas con caras triangulares únicamente; sólo se conocen en aniones de fórmula $(B_nH_n)^{2-}$; un poliedro de n átomos tiene $n + 1$ pares electrónicos en el esqueleto.
<i>nido</i>	Estructuras poliédricas no cerradas, en forma de nido; fórmula molecular B_nH_{n+4} ; hay $(n + 2)$ pares de electrones en el esqueleto; están ocupados n vértices de los $n + 1$ del poliedro <i>closo</i> precursor.
<i>aracno</i>	Estructuras poliédricas no cerradas, tipo telaraña; fórmula molecular B_nH_{n+6} ; hay $(n + 3)$ pares electrónicos en el esqueleto; se ocupan n vértices de los $n + 2$ del poliedro <i>closo</i> precursor.
<i>hifo-</i>	Estructura poliédrica abierta, en forma de red; fórmula molecular B_nH_{n+8} ; hay $n + 4$ pares electrónicos en el esqueleto; se ocupan n vértices de los $n + 3$ del poliedro <i>closo</i> precursor.
<i>klado-</i>	Estructura poliédrica abierta, en forma ramificada; fórmula molecular B_nH_{n+10} ; hay $n + 5$ pares electrónicos en el esqueleto; están ocupados n vértices de los $n + 4$ del poliedro <i>closo</i> precursor.

^a Algunas estructuras poliédricas cerradas pueden considerarse como derivados apicales sobre la cara abierta de estructuras *nido* o *aracno*. Éstas no satisfacen los principios comúnmente aceptados para estructuras y recuento de electrones [K. Wade, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 791 (1972); K. Wade, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, **18**, 1 (1976); R.E. Williams, *Inorg. Chem.*, **10**, 210 (1971); R.E. Williams, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, **18**, 67 (1976); D.M.P. Mingos, *Acc. Chem. Res.*, **17**, 311 (1984)] y ello probablemente refleje el número de orbitales y electrones aportados por el átomo apical al *clúster* poliédrico. Para tales casos se han sugerido los prefijos *iso-closo*, *pre-closo*, e *hiper-closo*. Además, algunos cúmulos presentan estructuras inconsistentes con el principio de remoción sucesiva de vértices BH de máxima conectividad. En tales casos se han aplicado los términos *iso-nido*, *iso-aracno*, etc. [R.T. Baker, *Inorg. Chem.*, **25**, 109 (1986); J.D. Kennedy, *Inorg. Chem.*, **25**, 111 (1986); R.L. Johnston and D.M.P. Mingos, *Inorg. Chem.*, **25**, 3321 (1986)].

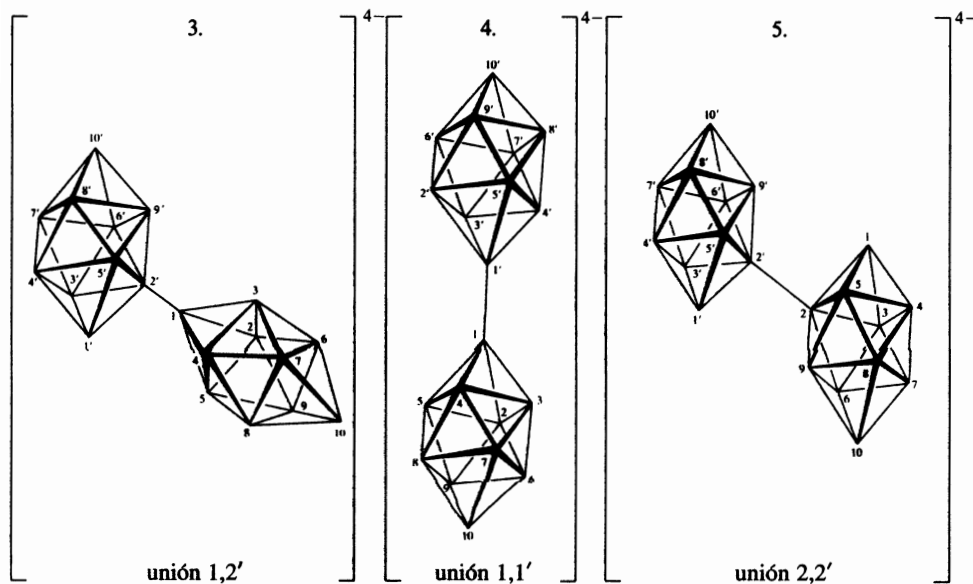
Ejemplos:



La unión entre clústeres poliédricos de hidruros de boro, se designa con el término general “conjuncto-boranos”. Los tipos de unión que se consideran aquí son de varias clases generales.

(a) Unión por un enlace directo dicéntrico boro–boro entre clústeres diferentes (sean o no *closo*), con la correspondiente eliminación de un átomo de hidrógeno de cada uno; los ejemplos 3, 4 y 5 presentan tres isómeros posibles para la asociación de dos iones $(B_{10}H_{10})^{2-}$ para dar $(B_{20}H_{18})^{4-}$.

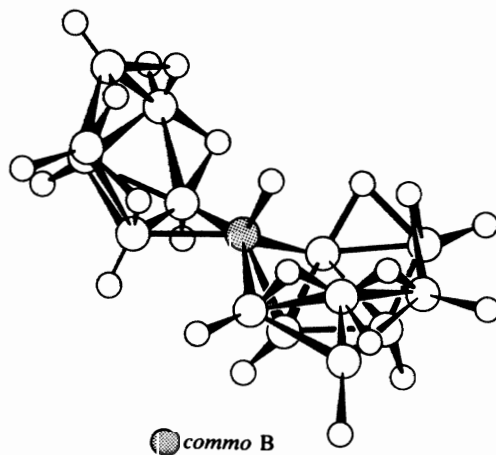
Ejemplos:



(b) Unión por compartición de un vértice, llamado el vértice *commo*, del tipo del ejemplo 6, que es una estructura que comparte un átomo de boro (sombreado) entre un cúmulo B_7 y otro B_9 .

Ejemplo:

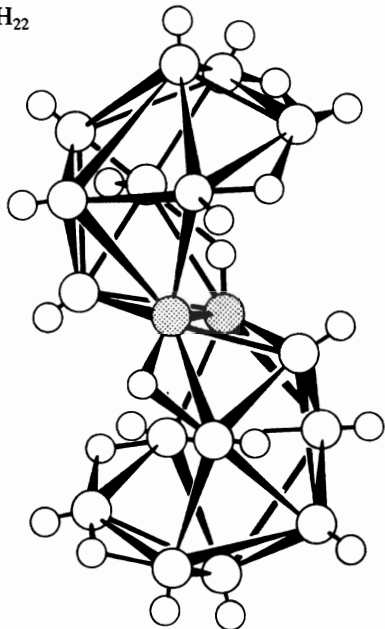
6. $B_{15}H_{23}$



(c) Unión por compartición de una arista del poliedro, definida por dos vértices comunes. En el ejemplo 7 hay dos cúmulos B_{10} que se unen al compartir la arista formada por los dos átomos sombreados, dando un hidruro neutro centrosimétrico *anti*- $B_{18}H_{22}$ (Nota 11c).

Ejemplo:

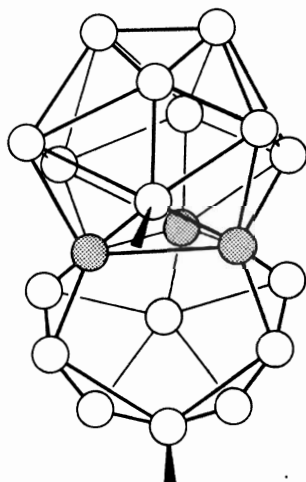
7. $B_{18}H_{22}$



(d) Unión por compartición de una cara deltaédrica común. El ejemplo 8 muestra dos cúmulos B_{11} y B_{12} compartiendo tres átomos de boro (sombreados) para dar el $B_{20}H_{18}$, del que sólo se conocen derivados. Se han omitido todos los átomos de hidrógeno.

Ejemplo:

$B_{20}H_{18}$



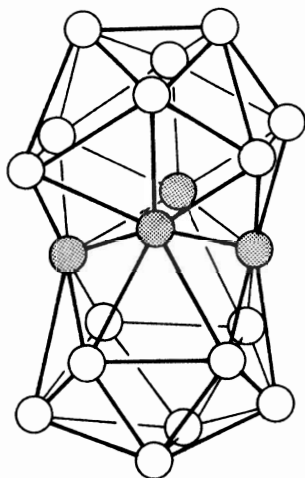
Nota 11c. Para la definición de *anti* y de *sin*, véase Y.M. Cheek, N.N. Greenwood, J.D. Kennedy, W.S. McDonald, *J. Chem. Commun.*, 80 (1982).

Cada posición dibujada con una valencia libre es un punto de unión de un ligando orgánico neutro en uno de los ejemplos conocidos.

(e) Uniones entre más átomos de dos clústeres. Aunque el *closo*-borano del ejemplo 9 puede nombrarse como una estructura poliédrica totalmente triangular, también puede considerarse que se comparten los cuatro átomos sombreados de dos cúmulos B_{13} . Se han omitido todos los átomos de hidrógeno.

Ejemplo:

9. *closo*- $B_{20}H_{16}$



I-11.3.2 Nombres de los hidruros de boro individuales.

I-11.3.2.1 Nombres estequiométricos

Los hidruros de poliboro neutros se llaman boranos y se da el nombre de “borano” a la estructura precursora más simple, el BH_3 (Nota 11d)

En los homólogos superiores, el número de átomos de boro se indica con un prefijo numérico apropiado, di-, tri-, tetra-, penta-, etc., a la raíz “borano”. Es preferible usar los prefijos latinos nona- y undeca- que los griegos ennea- y hendeca-, conforme a la nomenclatura de los hidrocarburos (véase la NQO).

El número de átomos de hidrógeno en la molécula se indica poniendo entre paréntesis el numeral arábigo correspondiente, a continuación del nombre. Así B_2H_6 se llama diborano(6), B_6H_{10} se llama hexaborano(10), y el $B_{10}H_{14}$ puede llamarse decaborano(14).

Tales nombres indican un cúmulo de x átomos de boro asociados con y átomos de hidrógeno, pero no dan información directa sobre su estructura.

Nota 11 d. La nomenclatura antigua que usaba “borino(a)” ha sido abandonada.

I-11.3.2.2 Nombres con descriptores estructurales (generalidades)

Se dan a continuación los nombres usuales para los hidruros de boro neutros más simples, con indicaciones sobre su fórmula estructural

		Número del ejemplo en la Sección I-11.3.2.2
(a) B_4H_{10}	<i>aracno</i> -tetraborano(10)	8
(b) B_5H_9	<i>nido</i> -pentaborano(9)	9
(c) B_5H_{11}	<i>aracno</i> -pentaborano(11)	10
(d) B_6H_{10}	<i>nido</i> -hexaborano(10)	11
(e) $B_{10}H_{14}$	<i>nido</i> -decaborano(14)	12

Por lo tanto, el nombre *nido*-hexaborano(10) es suficiente para dar la estructura del esqueleto de boro que se muestra en el ejemplo 11, obtenible formalmente por remoción de uno de los dos vértices de mayor conectividad del anión *closo*-(B_7H_7)²⁻ (véase la Tabla I-11.1). Debe observarse que los prefijos *nido*, *aracno*, etc., no se usan para los boranos más simples (como los ejemplos 1 y 7), para lo cuales la derivación formal de las estructuras *closo* precursoras por sustracciones sucesivas, como las arriba descritas, puede parecer forzada.

Ejemplo:

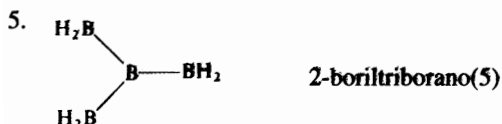
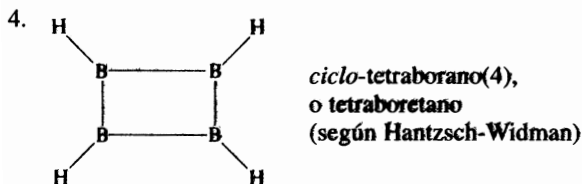
1. tetraborano(6), o
catena-tetraborano(6) $H_2B-BH-BH-BH_2$

Pueden adaptarse los métodos de la nomenclatura de hidrocarburos para los nombres de los hidruros fundamentales más simples, ya sean cadenas o ciclos; por ejemplo, basando los nombres de las cadenas ramificadas en el de la cadena principal no ramificada de átomos de boro, junto con el número arábigo entre paréntesis que indique el número de átomos de hidrógeno, y usando el sufijo *-eno* para señalar un doble enlace. En el caso de los ciclos, puede usarse el prefijo *ciclo* o la nomenclatura de Hantzsch-Widman extendida.

Ejemplos:

2. $H_2B-BH-BH_2$ triborano(5), o *catena*-triborano(5)

3. $HB=B-BH_2$ triboreno(3), o *catena*-triboreno(3)

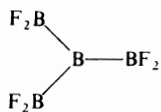


En el ejemplo 5 se ha seguido la nomenclatura de alcanos, siguiendo el principio de basar el nombre del compuesto ramificado en el de la cadena no ramificada más larga, y el número entre

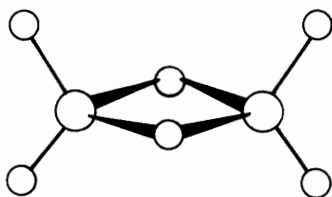
paréntesis se refiere al de átomos de hidrógeno en la cadena fundamental no sustituida. El compuesto real del ejemplo 6 se nombra como derivado del triborano(5).

Ejemplos:

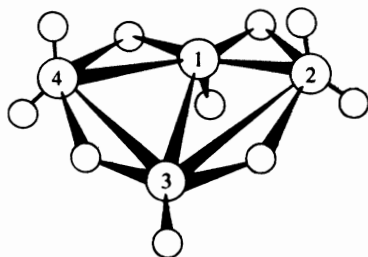
6. 2-(difluoroboril)-1,1,3,3-tetrafluorotriborano(5)



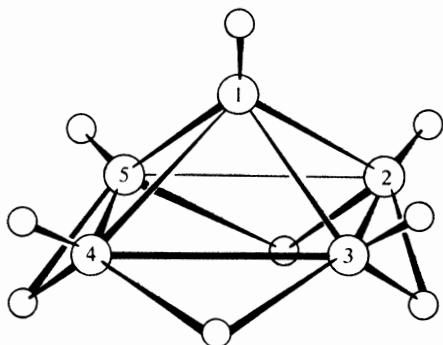
7. diborano(6), B_2H_6



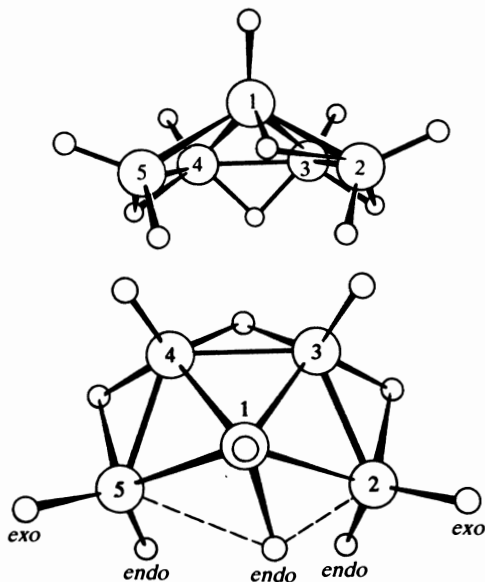
8. *aracno*-tetraborano(10), B_4H_{10}



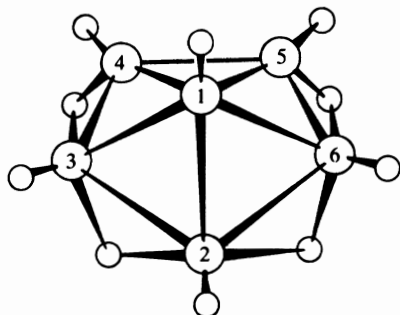
9. *nido*-pentaborano(9), B_5H_9



10. *aracno*-pentaborano(11), B_5H_{11}

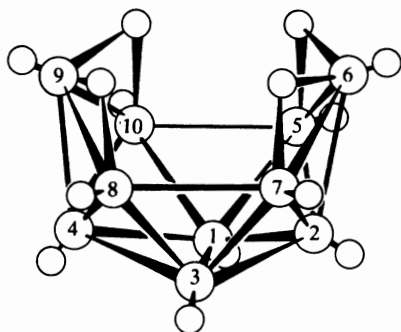


11. *nido*-hexaborano(10), B_6H_{10}



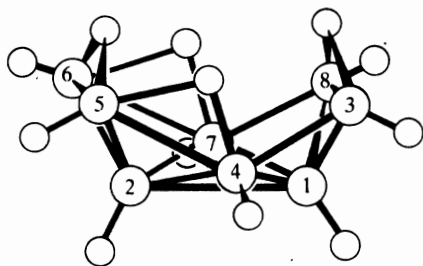
El esquema de numeración tradicional no asigna el conjunto menor de localizadores a los átomos de hidrógeno puente.

12. *nido*-decaborano(14), $B_{10}H_{14}$

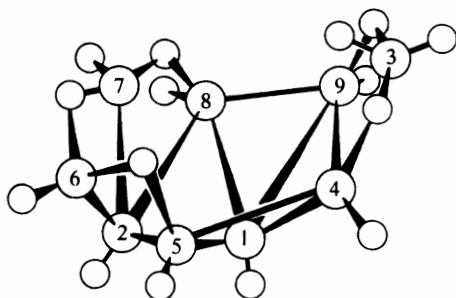


La numeración no estándar de los átomos de boro en esta molécula se trata en la Sección I-11.3.2.3 (Nota 11h).

13. *nido*-octaborano(12), B_8H_{12} (Nota 11e)



14. *aracno*-nonaborano(15), B_9H_{15}



Los nombres estequiométricos de los boranos poliédricos y de sus derivados se modifican a menudo con los prefijos descriptivos, *closo*, *nido*, etc., tratados en la Sección I-11.3.1.1, según que la estructura del cúmulo poliboránico sea un poliedro cerrado, con todas sus caras triangulares, o tenga uno o más vértices desocupados. Son bien conocidas las relaciones sistemáticas entre: (a) los tipos estructurales abiertos representados por los prefijos *nido*, *aracno*, etc., (b) las series de poliedros *closo*, y (c) las reglas de recuento de electrones (Nota 11f). Sin embargo, hay excepciones a estas reglas incluso en poliboranos simples (p. ej., B_8H_{12} , en el ejemplo 13, Sección I-11.3.2.2), y ciertamente en estructuras más complejas que incorporan ápices sobre caras poliédricas. Por esta razón, estos prefijos deben considerarse opcionales y deberían usarse solamente para calificar: (i) estructuras basadas en poliedros que se racionalizan por su relación con las series de poliedros cerrados; (ii) fórmulas moleculares como las resumidas en la Tabla I-11.2; (iii) cálculos particulares de electrones a los que se llega por la aplicación de las reglas de recuento electrónico.

Las estructuras *closo* de 6 y 12 vértices de la Tabla I-11.1, tienen una simetría tal que sus vértices son todos idénticos y se obtiene la misma estructura abierta, sea *nido* o *aracno*, independientemente de qué vértice o pareja de vértices se elimine, respectivamente. Sin embargo, en el caso de las otras estructuras representadas, los prefijos *nido* y *aracno* no son suficientemente precisos para indicar una única estructura, salvo que el prefijo *nido* se use para indicar que se ha eliminado un vértice de máxima conectividad y, el *aracno*, que se ha eliminado otro de tales vértices de la cara abierta de una estructura *nido*, según se han definido. No obstante, para generar

Nota 11e. Este clúster, que posee una estequiometría *nido*, adopta una estructura *nido* abierta alternativa, que puede considerarse también consistente con una estructura *aracno* (ver la Tabla I-11.1).

Nota 11f. Ver las referencias de la Nota 11a y la Tabla I-11.2.

las estructuras *aracno*-B₇ y -B₈ presentadas, debe optarse entre más de un vértice de igual conectividad en la estructura *nido* relacionada. La selección del vértice a eliminar se basa en la mayor estabilidad de las estructuras resultantes según contienen menor número de vértices dicoordinados en el esqueleto, que se designan en las publicaciones originales como “grupos BH₃ salientes” [R.E. Williams, *Inorg. Chem.*, **10**, 210 (1971); R.E. Williams, *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.*, **18**, 67 (1976)].

I-11.3.2.3 Numeración sistemática de los cúmulos (clústeres) poliédricos

Es necesario numerar sistemáticamente el esqueleto de boro de cada cúmulo, de modo que permita designar sin ambigüedad sus derivados sustituidos. Con este fin, se considera que los átomos de boro de las estructuras *closo* ocupan planos dispuestos secuencialmente, perpendiculares al eje de simetría de mayor orden (si hay dos, se elige el “más largo”, contando el mayor número de planos perpendiculares atravesados). La numeración comienza en el átomo de boro más cercano, al mirar el clúster a lo largo de dicho eje. Se continúa, en sentido horario o antihorario (Nota 11g), considerando primero los átomos del plano adyacente, y continuando luego en el mismo sentido con los del siguiente; en cada plano, se empieza con el átomo de boro más cercano al boro de menor número del plano precedente, y así sucesivamente hasta que se llega al átomo o arista más alejados. Como ejemplo, véase la estructura numerada del (B₁₀H₁₀)²⁻ en la Tabla I.11.1.

Por razones de simetría, puede no ser posible tomar un único vértice para el comienzo de la numeración. Así, en los cúmulos *closo*-B₆ y -B₁₂ de la Tabla I.11.1, columna 1, puede tomarse cualquier posición como la número 1. Análogamente, en el poliedro *closo*-B₇ puede tomarse como 1 las posiciones superior o inferior del dibujo. Sin embargo, para continuar se sigue el proceso de numeración descrito.

La numeración de los cúmulos *nido* deriva de la de las estructuras *closo* relacionadas. Obsérvese que el átomo de boro eliminado formalmente de la forma *closo* para generar la *nido* tiene la conectividad y número mayores posibles. Dicho número puede no corresponderse con el localizador prioritario generado en la estructura *closo* (véanse, p. ej., B₇H₁₁ y B₉H₁₃ en la Tabla I.11.1 (Nota 11h).

En el caso de los cúmulos *aracno* y más abiertos, la abertura se presenta hacia el observador y los átomos de boro se consideran como proyectados sobre un plano posterior. Se numeran secuencialmente por zonas, comenzando con el átomo de boro central de mayor conectividad y siguiendo en sentido horario o antihorario hasta que se completa la zona más interna; se continúa en el mismo sentido, desde la posición de las 12 horas, alrededor de la zona adyacente y así sucesivamente hasta completar la zona más externa (Nota 11i). Cuando haya una alternativa posible, la molécula se orienta de forma que la posición de las 12 quede en una posición que resulta de la aplicación secuencial de los siguientes criterios:

- (a) La posición de las 12 horas queda en un plano de simetría que contiene el menor número posible de átomos de boro.
- (b) La posición de las 12 queda en la porción del plano de simetría que contiene el mayor número de átomos del esqueleto (B₅H₁₁, Sección I-11.3.2.2, ejemplo 10).
- (c) La posición de las 12 queda opuesta al mayor número de átomos puente (B₉H₁₅, Sección I-11.3.2.2, ejemplo 14). Los criterios (a)–(c) pueden no resultar decisivos, y resultan inaplicables en ausencia de un plano de simetría. En tales casos, se usa la numeración tradicional (ejemplo 1).

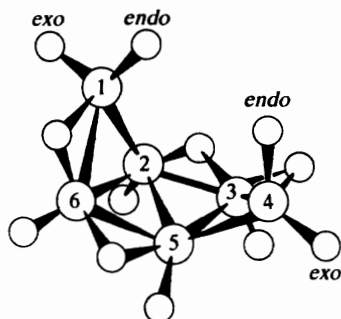
Nota 11g. Si estas dos direcciones dan un conjunto diferente de localizadores para los átomos reemplazantes y los sustituyentes, se elige el conjunto menor en el primer punto de diferencia.

Nota 11h. Una excepción es el *nido*-B₁₀H₁₄, que, por el uso generalizado, tiene una numeración basada en la de los sistemas *aracno*.

Nota 11i. Este tratamiento implica que es improbable que la numeración de un borano *closo* precursor pueda mantenerse en la del compuesto precursor *aracno* correspondiente.

Ejemplo:

1. *aracno*-hexaborano(12), B_6H_{12}



Cuando hay dos clústeres conectados, su numeración sigue los mismos principios para los componentes individuales, excepto que se indican con primas los números del clúster menor, dándose a los puntos de unión los menores localizadores numéricos compatibles con la numeración establecida para los poliedros.

En el caso de la unión *commo*, cada cúmulo se numera separadamente. El cúmulo menor se distingue nuevamente primando los números. En consecuencia, los átomos *commo* reciben dos números, uno del clúster mayor y otro del menor.

Si los dos clústeres conectados son idénticos, la cualidad de mayor o menor dependerá del criterio de reemplazo (subrogación) y, si aún no está claro, del de sustitución. Así, en las parejas de los ejemplos 3, 4, y 5, Sección I-11.3.1.2, si el vértice más elevado del clúster superior (en el dibujo) está ocupado por un átomo de carbono, se le adjudica el mayor rango. Si todo lo demás es igual, la mitad sustituida tiene preferencia sobre la no sustituida. Este tipo de asignación se tratará con detalle en una publicación posterior.

I-11.3.2.4 *Nombres sistemáticos para la distribución de los átomos de hidrógeno*

Una vez que se ha asignado la numeración del esqueleto, es posible derivar nombres que den la distribución exacta de los átomos de hidrógeno. En los boranos abiertos, puede suponerse que cada átomo de boro lleva al menos un átomo de hidrógeno, como en el precursor *closo*, pero es también necesario dar las posiciones de los átomos de hidrógeno puentes. Esto puede lograrse adaptando el método del hidrógeno indicado (Nota 11j) y usando el símbolo μ (véase el Capítulo I-10), precedido de localizadores para las posiciones del puente, en orden numérico ascendente. Obsérvese que para el átomo de hidrógeno se usa el indicador *H* y no el nombre "hidro", que podría dar a entender que implica la presencia de átomos de hidrógeno adicionales a los mostrados por los métodos normales. La puntuación debe compararse con la práctica citada en el Capítulo I-10.

Ejemplo:

2. B_9H_{15} 3,4:3,9:5,6:6,7:7,8-penta- μH -*aracno*-nonaborano(15)

Nota 11j. Ver la Regla A-21.6 de la Nomenclatura de Química Orgánica (NQO en el texto).

Este nombre no indica la posición del átomo de hidrógeno adicional sobre el átomo de boro 3 del B_9H_{15} , cuya estructura se muestra en el ejemplo 14, Sección I-11.3.2.2. Pueden omitirse los localizadores y los indicadores de puente cuando la distribución de los átomos de hidrógeno puente no presente ambigüedad (para ciertos *nido*- y *aracno*-boranos la teoría predice sólo una estructura). A continuación se da un nombre alternativo, de coordinación, que indica la distribución completa de los átomos de hidrógeno (Nota 11k).

Ejemplo:

3. B_9H_{15} 3,4:3,9:5,6:6,7:7,8-penta- μ -hidro-1,2,3,3,4,5,6,7,8,9-decahidro-*aracno*-nonaboro

I-11.3.2.5 *Indicadores estéricos endo- y exo-*

Los átomos de boro en los clústeres abiertos (*aracno*-, etc.) pueden tener dos átomos de hidrógeno terminales, uno correspondiente al enlace B–H del poliedro *closo*, dirigido hacia el exterior, y el otro dirigido tangencialmente hacia la cavidad abierta del cúmulo. Cuando sea necesario, se puede distinguir el primero con el prefijo *exo*- y el segundo con *endo*-.

Los átomos de hidrógeno *endo* se designan en la Sección I-11.4.2, ejemplo 1, donde los átomos de hidrógeno adicionales en B_3 y B_4 son obviamente átomos *exo*. Véanse también las Secciones I-11.3.2.2, ejemplo 10, y I-11.3.2.3, ejemplo 1. Se han caracterizado compuestos que llevan en posición *endo* átomos distintos del hidrógeno.

I-11.3.2.6 *Isómeros estructurales*

No hay un método general sencillo para distinguir isómeros estructurales en los hidruros de boro, pero los principios expuestos anteriormente pueden permitir la asignación de un nombre específico a cada isómero. Se han utilizado los prefijos *iso*- y *neo*- para tal distinción, pero su uso debiera reservarse para isómeros cuyas estructuras no han sido determinadas. Dichos prefijos no tienen un significado estructural específico. Sin embargo, se ha propuesto un método que describe todos los sistemas poliédricos isoméricos conocidos (véanse referencias en la nota 11a).

I-11.3.2.7 *El método “desbor” para nombrar cúmulos (clústeres) de poliboro abiertos*

Otro método para nombrar tales estructuras consiste en sistematizar el uso de *nido*- y *aracno*-, para designar exactamente las posiciones de remoción desde los precursores *closo*-, por medio de localizadores numéricos. Este enfoque sustractivo se ha generalizado por el método llamado “desbor”. En estos nombres, cada vértice BH eliminado del correspondiente clúster *closo* se indica con el prefijo desbor-, junto con el localizador numérico del vértice eliminado (véase más adelante). El significado de desbor- es en este caso, análogo al de nor- en la nomenclatura orgánica sustractiva, donde señala la remoción de un grupo CH_2 de una estructura dada (Nota 111). La eliminación de más de un vértice se indica en el nombre por *didesbor*-, *tridesbor*-, etc. (compárese con *dinor*-, *trinor*-). Sigue después el nombre del compuesto *closo* precursor.

El localizador para desbor- debe ser el mayor número posible que sea consistente con la numeración fijada para el poliedro cerrado precursor. El número de átomos de hidrógeno en el hidruro abierto se indica agregando el correspondiente número arábigo, entre paréntesis, al final del nombre.

Nota 11k. Para el caso de los compuestos de boro se prefiere, por excepción, “hidro” al término más general “hidruro” para el hidrógeno como ligando.

Nota 111. Ver las Reglas C-42 y 43 y la Sección F-4 de la NQO.

Ejemplo:

1. El *nido*-hexaborano(10), B₆H₁₀, puede nombrarse 7-desbor-*closo*-heptaborano(10)

La distribución de los átomos puente no queda automáticamente indicada por dichos nombres y, en caso de duda, puede resolverse, como en la Sección I-11.3.2.3, por medio de μH con los localizadores apropiados.

Ejemplo:

2. El *nido*-hexaborano(10) puede también nombrarse 2,3:2,6:3,4:5,6-tetra- μH -7-desbor-*closo*-heptaborano(10).

Cualquiera que sea el método usado, el número entre paréntesis al final del nombre representa el número de átomos de hidrógeno en el hidruro que se nombra, y no en el clúster *closo* precursor.

Los métodos antes presentados tienen ventajas en diferentes circunstancias específicas y el empleo de un método concreto dependerá de las necesidades del usuario.

I-11.4 SUSTITUCIÓN Y REEMPLAZO EN CLÚSTERES (CÚMULOS) DE BORO

I-11.4.1 Sustitución de hidrógenos

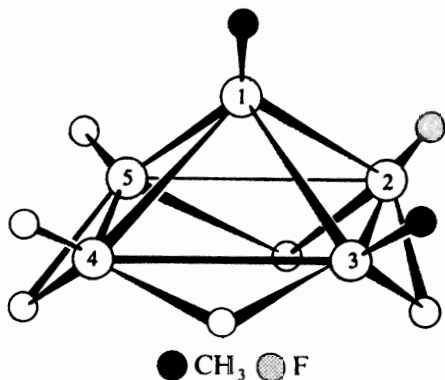
Los compuestos que contienen un único átomo de boro se nombran como derivados del BH₃, borano. Para nombrar derivados por sustitución de los hidruros neutros de boro se siguen los procedimientos de la nomenclatura orgánica de sustitución (véase la Sección I.7.2.3). El número de átomos de hidrógeno del hidruro precursor se indica con el nombre del hidruro apropiado (terminación en -ano), junto con los indicadores de hidrógeno adecuados. La sustitución se indica a continuación citando los nombres de los grupos sustituyentes en orden alfabético, con prefijos numéricos, di-, tri-, etc., cuando corresponda, y se asigna a cada radical su localizador numérico de posición. Los números entre paréntesis al final de un nombre indican la población de hidrógenos antes de la sustitución.

Ejemplos:

- | | |
|--|--|
| 1. HBCl ₂ | dicloroborano |
| 2. BBr ₂ F | dibromofluoroborano |
| 3. B(OH) ₃ | trihidroxiborano [también llamado ácido bórico (Tabla I-9.1)] |
| 4. BCl(OCH ₃) ₂ | clorodimetoxiborano |
| 5. B(OC ₂ H ₅) ₃ | trietoxiborano [también llamado borato de trietilo (Capítulo I-9)] |
| 6. B(CH ₃)(SCH ₂ CH ₃) ₂ | bis(etiltio)(metil)borano (Nota 11m) |
| 7. BCl(OCHCl ₂) ₂ | clorobis(diclorometoxi)borano (Nota 11m) |
| 8. B[NHN(CH ₃) ₂] ₃ | tris(2,2-dimetilhidrazino)borano |

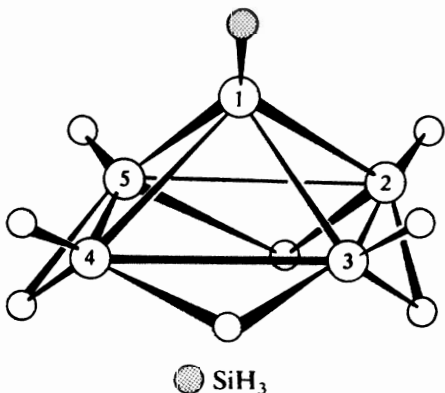
Nota 11m. Estos compuestos también se nombraron como derivados de los ácidos borínico (R₂BOH) y borónico [RB(OH)₂], pero tales nombres ya no son recomendados por la IUPAC.

9. $B(OMe)Me_2$ metoxidimetilborano (Nota 11m)
 10. $BMe(OH)_2$ dihidroxi(metil)borano (Nota 11m)
 11. Br_2BBBr_2 tetrabromodiborano(4)
 12.



2-fluoro-1,3-dimetilpentaborano(9)

13.

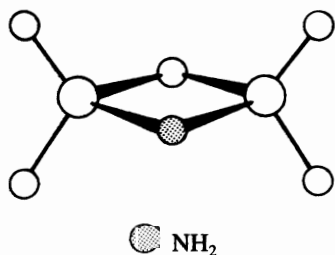


1-silil-2,3:2,5:3,4:4,5-tetra- μH -pentaborano(9)

Los sustituyentes para los grupos puente se indican mediante el prefijo μ colocado delante del nombre del grupo sustituyente. De nuevo, cuando hay alternativas para los localizadores, se eligen los menores.

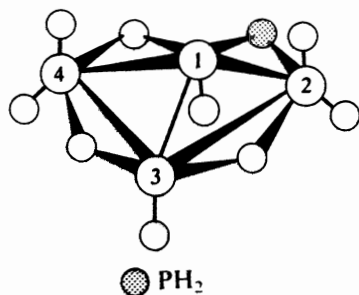
Ejemplos:

14.

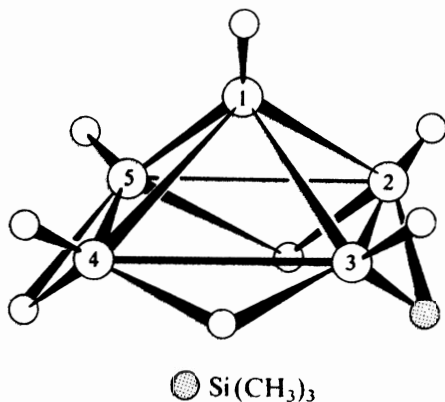


μ -amino-diborano(6)

15.

1,2- μ -fosfino-*aracno*-tetraborano(10)

16.

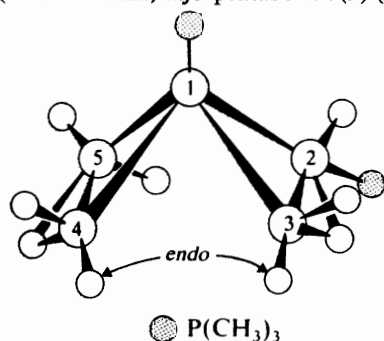
2,3- μ -trimetilsilil-2,5:3,4:4,5-tri- μ H-*nido*-pentaborano(9)

I-11.4.2 Formación de aductos

La comparación de cualquier estructura de la columna central de la Tabla I-11.1 con la inmediatamente a su derecha, manifiesta una progresión hacia una estructura más abierta, acompañada por la adición de dos átomos de hidrógeno y, en consecuencia, de otros dos electrones. La formación de un aducto con un ligando neutro, como la trifenilfosfina, tiene en general el mismo efecto de suministrar electrones adicionales al clúster, causando un reordenamiento a un derivado más abierto con el mismo número de átomos de hidrógeno. Así el cúmulo *hifo*- del ejemplo 1 resulta de la formación de un aducto con el *nido*-pentaborano(9). El compuesto se nombra corrientemente como un compuesto de *cuasi*-adición.

Ejemplo:

1. (trimetilfosfina)-*hifo*-pentaborano(9) (2/1), [B₅H₉ · (PMe₃)₂]



En este ejemplo los hidrógenos *endo* están por delante en la estructura, apuntando hacia abajo y hacia el lector.

I-11.4.3 Reemplazo en el esqueleto (subrogación)

I-11.4.3.1 Generalidades

En la formación de los clústeres de boro antes descritos, es posible preservar lo esencial del esqueleto estructural en los derivados en que uno o más de los átomos de boro son reemplazados por otros átomos (nótese que BH_2 , BH^- y CH son isoelectrónicos). Los nombres de tales especies se forman adaptando la nomenclatura orgánica por reemplazo, y se originan los carbaboranos, azaboranos, fosfaboranos, tiaboranos, etc.

En los heteroboranos, el número de vecinos más cercanos al heteroátomo es variable y puede ser 5, 6, 7, etc. Por tanto, en la adaptación de la nomenclatura por reemplazo orgánica a los poliboranos, se indica en el nombre la sustitución de un átomo de boro por otro átomo, junto con el número de átomos de hidrógeno en la estructura poliédrica resultante. Se mantienen los prefijos *closo-*, *nido-*, *aracno-*, etc., como se indicó anteriormente. Las posiciones de los heteroátomos intrusos en la red poliédrica se indican por medio de localizadores, que son el conjunto más bajo posible de números compatible con la numeración del poliborano precursor. Si hubiera alternativas para la asignación de localizadores dentro de un conjunto dado, la prioridad para la numeración más baja debe asignarse al elemento que se encuentra antes en la Tabla IV, como es habitual.

I-11.4.3.2 Carbaboranos (Nota 11n)

La fórmula general de esta importante clase de compuestos es $[(\text{CH})_a(\text{BH})_m\text{H}_b]^c$, donde c puede ser positivo, negativo o cero. Los grupos CH ocupan vértices del poliedro y otros átomos de hidrógeno pueden ser puente (μH) o terminales *endo*. Los nombres de los carbaboranos se basan en la estructura del hidruro de poliboro fundamental, y se mantiene el significado de los prefijos *closo*, *nido*, *aracno*, etc. Los localizadores para los átomos reemplazantes han de ser tan bajos como sea posible, de acuerdo con la numeración fijada para el poliedro.

La población de átomos de hidrógeno del compuesto en cuestión (y no la del hidruro fundamental homobórico) se agrega al final del nombre, con un número arábigo entre paréntesis. Este número se conserva en los nombres de los derivados formados por sustitución de átomos de hidrógeno. En todos los diagramas siguientes los átomos de carbono se representan con círculos negros y los de boro con círculos blancos.

Ejemplo:

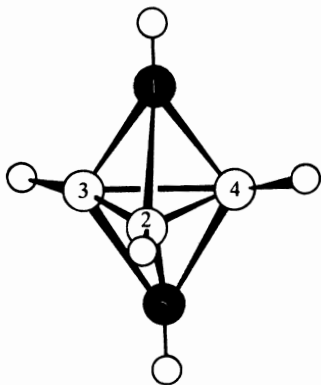
1. $\text{C}_2\text{B}_{10}\text{H}_{12}$, dicarba-*closo*-dodecaborano(12)

Es isoelectrónico con el anión dodecahidro-*closo*-dodecaborato(2-). Tiene tres posibles isómeros: 1,2-, 1,7-, y 1,12-, respectivamente (no se recomienda para ellos el uso de *orto-*, *meta-*, y *para-*). Análogamente, el 1,6-dicarba-*closo*-hexaborano(6) es isoelectrónico con el hexahidro-*closo*-hexaborato(2-).

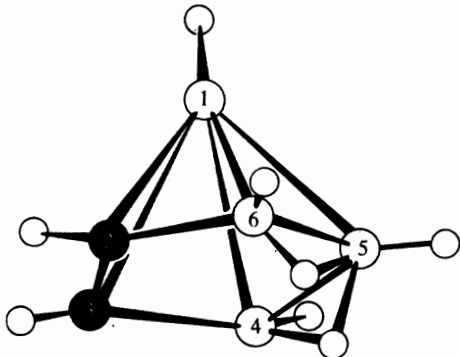
Nota 11n. La contracción "carboranos" está igualmente bien establecida como nombre genérico para esta clase de compuestos.

Ejemplos:

2. $C_2B_3H_5$, 1,5-dicarba-*closo*-pentaborano(5)



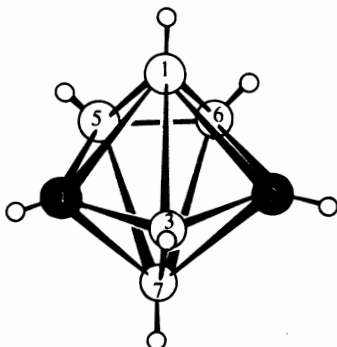
3. $C_2B_4H_8$, 4,5:5,6-di- μ H-2,3-dicarba-*nido*-hexaborano(8)



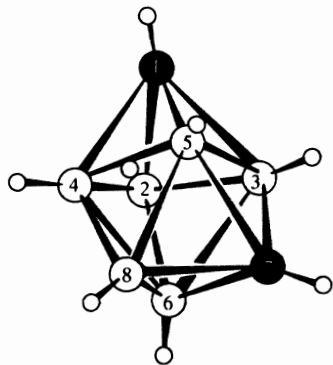
Obsérvese que los localizadores para el reemplazo en el esqueleto tienen preferencia sobre los usados para los puentes de hidrógeno. El número de átomos de hidrógeno puente es en general diferente en los heteroboranos en comparación con los poliboranos precursores y, a efectos de numeración, sólo se considera la simetría del esqueleto del borano precursor.

Ejemplos:

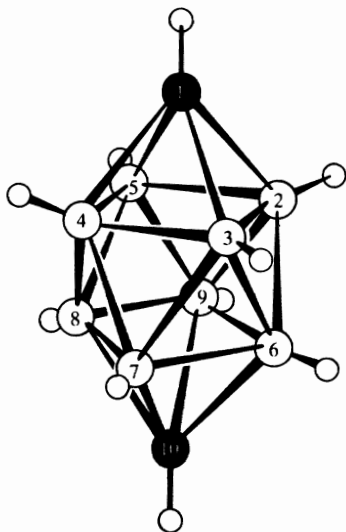
4. $C_2B_5H_7$, 2,4-dicarba-*closo*-heptaborano(7)



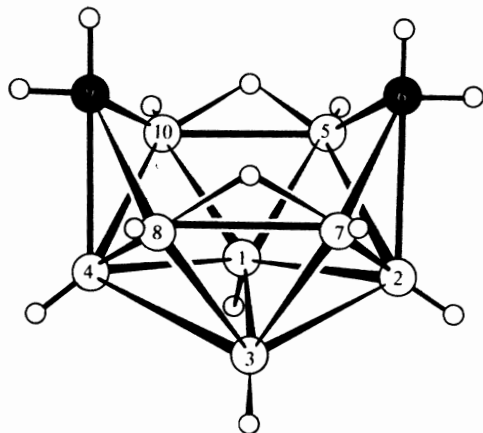
5. $C_2B_6H_8$ 1,7-dicarba-*closo*-octaborano(8)



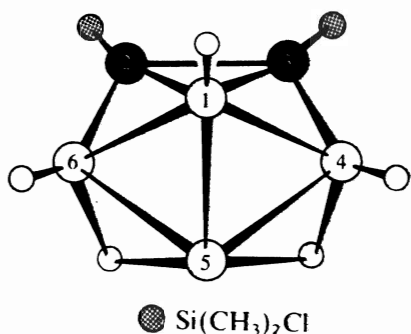
6. $C_2B_8H_{10}$ 1,10-dicarba-*closo*-decaborano(10)



7. $C_2B_8H_{14}$ 6,9-dicarba-*aracno*-decaborano(14)



8. $C_6H_{17}B_4Cl_2Si_2$, 2,3-bis(clorodimetilsilil)-4,5:5,6-di- μH -2,3-dicarba-*nido*-hexaborano(8)

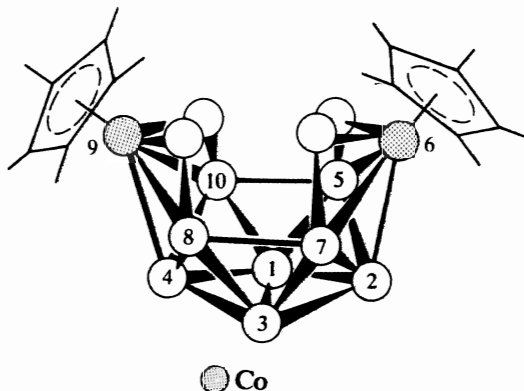
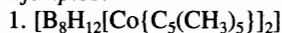


I-11.4.3.3 Metalaboranos y metalacarbaboranos

Estos se tratarán en más detalle en una publicación posterior, pero unos pocos ejemplos bastarán para indicar cómo puede retenerse lo esencial de la morfología de los cúmulos poliédricos de boranos cuando se reemplazan uno o más de los átomos de boro por un metal. Los clústeres metalaboranos pueden ser neutros o iónicos.

Para nombrar tales especies se adapta la nomenclatura por reemplazo, citando los prefijos apropiados de la Tabla VI (véase también la Tabla I de la NQO). Se asignan los localizadores más bajos *consistentes con la numeración prefijada del poliedro* y, si existe alguna alternativa, la preferencia para los localizadores menores va a los elementos que se encuentran antes en el orden de la Tabla IV (véase también la Sección I-11.4.3.1)

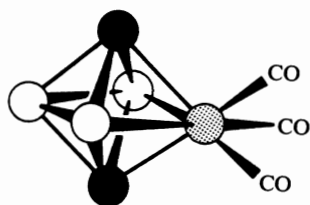
Ejemplos:



6,9-bis(η^5 -pentametilciclopentadienil)-5,6:6,7,8,9:9,10-tetra- μH -6,9-dicobalta-*nido*-deca-borano(12) (Nota 11o)

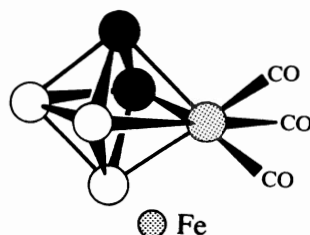
Nota 11o. Por razones de claridad, se han omitido los átomos de hidrógeno unidos a los átomos de boro. Para la denominación de los ligandos unidos a los átomos metálicos, ver el Capítulo I-10. Para determinar el número a poner entre paréntesis, se supone que los átomos metálicos en estos compuestos no llevan átomos de hidrógeno en el compuesto fundamental no sustituido. De aquí que cualquier átomo de hidrógeno que allí exista deba especificarse.

2. $[(CH_2)_2(BH)_3Fe(CO)_3]$



2,2,2-tricarbonyl-1,6-dicarba-2-ferrocloso-hexaborano(5) (no 2,4-dicarba-1-ferro-)

3. $[(CH_2)_2(BH)_3Fe(CO)_3]$



3,3,3-tricarbonyl-1,2-dicarba-3-ferrocloso-hexaborano(5) (no 1,3-dicarba-2-ferro-)

I-11.4.3.4 *Compuestos organobóricos*

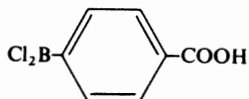
En general, los nombres para los compuestos con enlaces covalentes dicéntricos, que contienen otros no metales, se forman a partir del fragmento con boro (nombre del ion, hidruro o cúmulo). Sin embargo, los compuestos organobóricos pueden nombrarse también según las reglas de la nomenclatura orgánica.

Ejemplos:

1. $B(OCOMe)_3$

triacetoxiborano [basado en el hidruro precursor BH_3], o
tris(acetato)boro [nomenclatura de coordinación]

2.



(4-carboxifenil)dichloroborano, o
ácido 4-(dichloroboril)benzoico

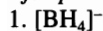
I-11.5 NOMBRES DE LOS IONES

I-11.5.1 Aniones

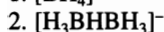
Hay ejemplos de aniones en todos los tipos estructurales antes descritos. Sus nombres se forman usando los mismos prefijos numéricos y estructurales que para los hidruros neutros, pero los nombres terminan en “borato” en lugar de “borano”. La población de átomos de hidrógeno se indica con un prefijo numérico apropiado combinado con “hidro”, y la carga iónica se indica entre paréntesis al final. Así, las estructuras de la Tabla I-11.1 con todos sus átomos de hidróge-

no se nombran pentahidro-*closo*-pentaborato(2-), hexahidro-*closo*-hexaborato(2-), heptahidro-*closo*-heptaborato(2-), etc., y los ejemplos 3, 4 y 5 de la Sección I-11.3.1.2 son octadecahidro-1,1'-(o 1,2'-, o 2,2'-)-bi-*closo*-decarbaborato(4-). Para las estructuras abiertas, esta nomenclatura puede necesitar una ampliación como se describió en las Secciones I-11.3.2.3 y I-11.3.2.4, para poder asignar localizadores a los átomos de hidrógeno.

Ejemplos:



tetrahidroborato(1-)



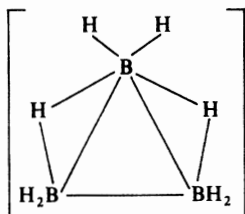
heptahidrodiborato(1-), o

μ -hidro-hexahidrodiborato(1-)



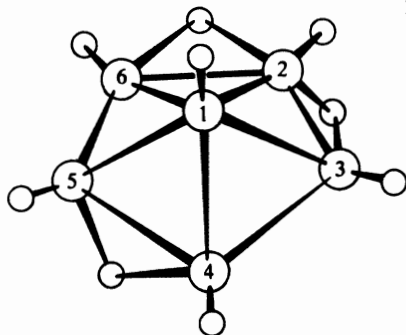
octahidro-*ciclo*-triborato(1-), o

1,2:1,3-di- μ -hidro-hexahidro-*ciclo*-triborato(1-)



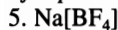
nonahidrohexasborato(1-), o

2,3:2,6:4,5-tri- μ -hidro-hexahidro-*nido*-hexaborato(1-)



Puede omitirse en el nombre la carga iónica cuando el estado de oxidación del metal en las sales es inequívoco.

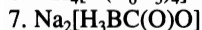
Ejemplos:



tetrafluoroborato de sodio



tetrafenilborato de amonio

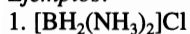


carboxilatotrihidroborato(2-) de sodio, o
carboxilatotrihidroborato disódico

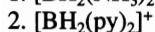
I-11.5.2 Cationes

Los nombres de los cationes no llevan una terminación distintiva; el nombre del ion termina en "boro". Todos los átomos y grupos unidos reciben los nombres como ligandos.

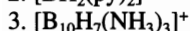
Ejemplos:



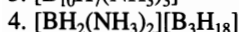
cloruro de diamminodihidroboro(1+)



ion dihidrobis(piridina)boro(1+)



ion triamminheptahidro-*closo*-decarboro(1+)

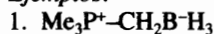


octahidro-*ciclo*-triborato de diamminodihidroboro

I-11.5.3 Estructuras con centros aniónicos y catiónicos (*zwitteriones*)

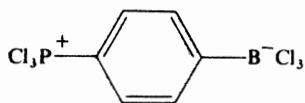
Estos se nombran como aniones, y los prefijos, que se citan en orden alfabético, incluyen un prefijo catiónico sustitutivo apropiado.

Ejemplos:



trihidro(trimetilfosfoniometil)borato

2.



triclora[4-(triclorafluoroboronio)fenil]borato

Cuando las posiciones cargadas están adyacentes, se las puede nombrar como compuestos de adición (véase el Capítulo I.5).

I-11.6 NOMBRES DE LOS RADICALES (GRUPOS SUSTITUYENTES)

El grupo H_2B^- se llama “boril(o)” y sus derivados se nombran por sustitución.

Ejemplos:

1. Cl_2B^- dicloroborilo (o dicloroboril)
2. $(\text{OH})_2\text{B}^-$ dihidroxiborilo
3. $\text{O}=\text{B}^-$ oxoborilo
4. $\text{S}=\text{B}^-$ tioxoborilo

Otras formas polivalentes son HB^- , boranodiilo, y $-\text{B}^-$, boranotriilo. El nombre “diborilo” significa dos grupos H_2B^- .

Ejemplo:

5. BrB^- bromoboranodiilo

Si no se especifica el número de enlaces del grupo o radical, puede usarse la forma “borio”.

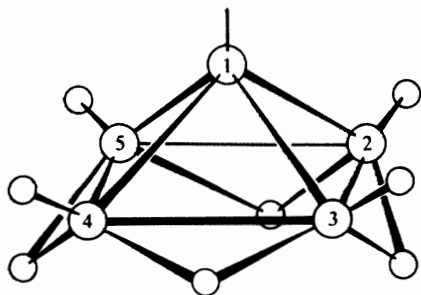
Ejemplos:

6. Cl_2B^- dicloroborio
7. HB^- hidroborio
8. HOB^- hidroxoborio
9. $-\text{B}^-$ borio

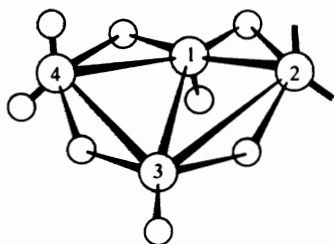
Para los grupos y radicales derivados de los poliboranos, se modifica el nombre del hidruro precursor con su número de hidrógenos entre paréntesis, como sigue. Para los grupos univalentes se hace elisión sólo de la “o” de “borano”. Los localizadores para las posiciones de valencias libres van separados por comas, si hay más de uno, y flanqueados por guiones, precediendo a los sufijos -ilo, -diilo, -triilo, etc. Cuando hay alternativas en la numeración, las posiciones de valencia libre reciben el localizador menor compatible con la numeración fijada, pero después de asignar las posiciones sustituidas, o subrogadas (véase la Sección I-11.4.3).

Ejemplos:

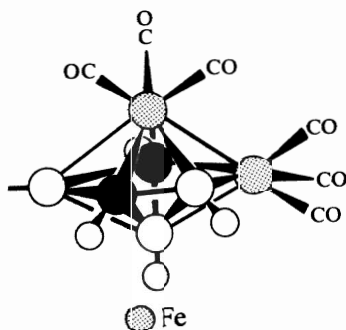
- | | |
|--------------------------------------|----------------------------------|
| 10. H_2BH_2BH- | diboran(6)-1-ilo |
| 11. $-HBH_2BH-$ | <i>cis</i> -diboran(6)-1,2-diilo |
| 12. $H_2BH_2B<$ | diborano(6)-1,1-diilo |
| 13. $-HBBH-$ | diborano(4)-1,2-diilo |
| 14. <i>nido</i> -pentaboran(9)-1-ilo | |



15. *aracno*-tetraborano(10)-2,2,-diilo



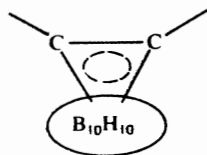
16. 1,1,1,3,3,3-hexacarbonil-2,5-dicarba-1,3-diferra-*closo*-heptaborano-6-ilo



Los radicales o grupos formados por la remoción de hidrógenos puente se indican encerrando entre paréntesis los numerales de los átomos a los que estaba unido el puente, separados por una coma.

Ejemplos:

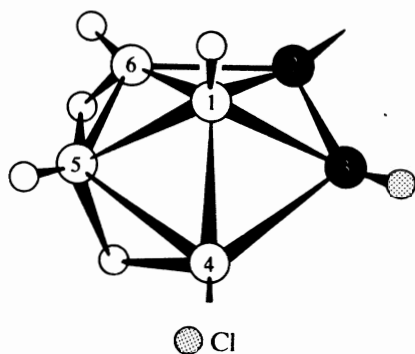
17. 1,2-dicarba-*closo*-dodecaborano(12)-1,2-diilo



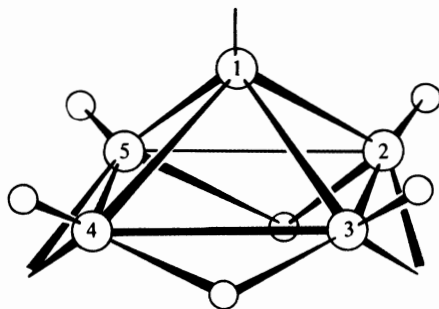
La representación simplificada de este ejemplo para el esqueleto dodecaédrico regular $B_{10}C_2$ es muy usada (cf., la estructura de la línea 12 de la Tabla I-11.1)

Ejemplos:

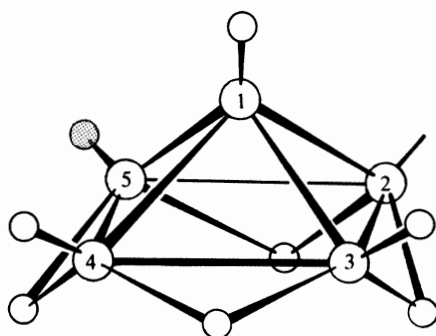
18. 3-cloro-2,3-dicarba-*nido*-hexaborano(8)-2,4-diilo



19. *nido*-pentaborano(9)-1,(2,3- μ)(4,5- μ)-triilo



20. 5-cloro-*nido*-pentaborano(9)-2-ilo



I-11.7 OBSERVACIONES FINALES

Se han considerado en este Capítulo las estructuras *closo*- regulares hasta las B_{12} incluidas. Sin embargo, la teoría y la experimentación han demostrado que también son estables poliedros

mayores y otros poliedros cerrados con caras de más de tres aristas. Estas estructuras de boro, y otras de mayor complejidad, presentan problemas particulares en su nomenclatura y se considerarán en una publicación posterior.

Esta variedad y complejidad estructural se halla también en los boruros metálicos, pero estos se tratan mejor con nombres estequiométricos (Capítulo I-5).

Los boruros intersticiales y los compuestos de adición del boro se tratan en el Capítulo I-5; algunos compuestos cíclicos en el Capítulo I-7 (Nota 11p) y los oxoaniones del boro se comentan en el Capítulo I-9.