

I-4 FÓRMULAS

CONTENIDO

- I-4.1 Introducción
- I-4.2 Definiciones de los tipos de fórmulas
 - I-4.2.1 Fórmula empírica
 - I-4.2.2 Fórmula molecular
 - I-4.2.3 Fórmula estructural
 - I-4.2.4 Información estructural en estado sólido
- I-4.3 Indicación de las proporciones de los constituyentes
 - I-4.3.1 Número de átomos o de grupos
 - I-4.3.2 Fases sólidas
- I-4.4 Indicación del estado de oxidación y de la carga de los constituyentes
 - I-4.4.1 Estados de oxidación
 - I-4.4.2 Carga iónica
 - I-4.4.3 Radicales libres
- I-4.5 Otros modificadores de las fórmulas
 - I-4.5.1 Compuestos ópticamente activos
 - I-4.5.2 Estados excitados
 - I-4.5.3 Modificadores estructurales
- I-4.6 Secuencia de citación de los símbolos
 - I-4.6.1 Prioridades
 - I-4.6.1.1 Generalidades
 - I-4.6.1.2 Electronegatividades y orden de citación
 - I-4.6.1.3 Orden alfabético
 - I-4.6.2 Compuestos binarios entre no metales
 - I-4.6.3 Compuestos en cadena
 - I-4.6.4 Iones poliatómicos
 - I-4.6.5 Compuestos o grupos poliatómicos
 - I-4.6.6 Compuestos intermetálicos
 - I-4.6.7 Compuestos de coordinación
 - I-4.6.7.1 Resumen de los formalismos usados
 - I-4.6.7.2 Abreviaturas
 - I-4.6.8 Compuestos de adición
- I-4.7 Compuestos modificados isotópicamente
 - I-4.7.1 Formalismo general
 - I-4.7.2 Compuestos sustituidos isotópicamente
 - I-4.7.3 Compuestos marcados isotópicamente
 - I-4.7.3.1 Tipos de marcación
 - I-4.7.3.2 Compuestos marcados específicamente
 - I-4.7.3.3 Compuestos marcados selectivamente
- I-4.8 Observaciones finales

I-4.1 INTRODUCCIÓN

Las fórmulas (empíricas, moleculares y estructurales) son un método simple y claro de designar los compuestos. Son de particular importancia en las ecuaciones químicas y en las descripciones de los procedimientos químicos. Su normalización es útil para evitar ambigüedades y para muchos otros fines, p. ej., su uso en sistemas informáticos de documentación (Nota 4a).

I-4.2 DEFINICIONES DE LOS TIPOS DE FÓRMULAS

I-4.2.1 Fórmula empírica

La fórmula empírica de un compuesto está formada por la yuxtaposición de símbolos atómicos, con los subíndices apropiados (Sección I-3.4), para dar la fórmula más sencilla que exprese la composición. El orden de citación de los símbolos se indica en la Sección I-4.6, pero *a falta de cualquier otro criterio de ordenamiento*, en la fórmula empírica debe usarse el orden alfabético de los símbolos, excepto para compuestos que contienen grupos orgánicos, en los cuales el C y el H se citan generalmente en primer y segundo lugar, respectivamente. Las fórmulas empíricas no pueden usarse para el cálculo de las masas moleculares o iónicas.

Ejemplos:

- | | |
|--------------------------------------|---|
| 1. ClK | 6. NS |
| 2. CaO ₄ S | 7. C ₆ FeK ₄ N ₆ |
| 3. O ₄ Rb ₂ S | 8. C ₁₀ H ₁₀ ClFe |
| 4. Cl ₆ K ₃ Mo | 9. Cl ₆ H ₈ N ₂ W |
| 5. ClHg | 10. BrClH ₃ N ₂ NaO ₂ Pt |

I-4.2.2 Fórmula molecular

Para compuestos formados por moléculas discretas, la fórmula molecular está de acuerdo con la masa molecular relativa (o la estructura). Para el orden de citación de los símbolos véase la Sección I-4.6.

Ejemplos:

- | | |
|---|--------------------------------------|
| 1. S ₂ Cl ₂ | (no SCl) |
| 2. H ₄ P ₂ O ₆ | (no H ₂ PO ₃) |
| 3. Hg ₂ Cl ₂ | (no HgCl) |

Es preferible la fórmula empírica cuando la masa molecular relativa varía con la temperatura u otras condiciones, salvo que se desee indicar la complejidad molecular.

Ejemplos:

- | | | |
|------|------|--|
| 4. S | 5. P | 6. NO ₂ (y no S ₈ , P ₄ , N ₂ O ₄) |
|------|------|--|

Para el criterio de ordenamiento de los símbolos véase la Sección I-4.6.

Nota 4a. No se recomienda el uso generalizado de fórmulas en un texto, pero puede resultar preferible una fórmula a un nombre muy extenso o complicado, excepto al comienzo de una frase.

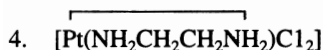
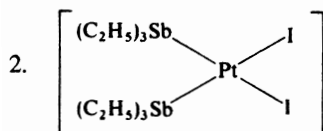
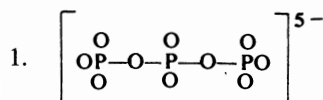
Al referirse a iones, radicales, etc., en lugar de especies moleculares, algunos autores prefieren el término general "fórmula de grupo".

I-4.2.3 Fórmula estructural

Una fórmula estructural (tal como una fórmula estereoquímica, Nota 4b) da información sobre la forma en que los átomos de una molécula están conectados y dispuestos en el espacio. Una fórmula lineal puede dar información estructural, pero una fórmula desarrollada (como en el ejemplo 2, a continuación), probablemente más. Si es necesario, puede incorporar prefijos estructurales (ver la Tabla V y la Sección I-4.5.3).

Las recomendaciones para presentar las fórmulas moleculares pueden no resultar válidas si se inserta información estructural.

Ejemplos:



I-4.2.4 Información estructural en estado sólido

También puede darse información estructural indicando el tipo de estructura, como una calificación de la fórmula estequiométrica (véase la Sección I-6.7.2). Por ejemplo, pueden identificarse los polimorfos añadiendo entre paréntesis una expresión abreviada del sistema cristalino. Las estructuras pueden designarse también añadiendo el nombre de un compuesto tipo, en cursiva y entre paréntesis, pero este uso puede resultar ambiguo. Hay por lo menos diez variedades de $\text{ZnS}(h)$. Cuando hay cierto número de polimorfos que cristalizan en el mismo sistema, pueden diferenciarse por el símbolo de Pearson (véase también la Sección I-3.7.3). Con frecuencia se emplean letras griegas en la designación de los polimorfos, pero tal uso es a menudo confuso y contradictorio. Por consiguiente, es preferible en general emplear alguno de los métodos antes indicados.

Ejemplos:

1. $\text{TiO}_2(t)$ (tipo *rutilo*)
2. $\text{TiO}_2(t)$ (tipo *anatasa*)
3. $\text{TiO}_2(r)$ (tipo *brookita*)
4. $\text{AuCd}(c)$ o $\text{AuCd}(\text{tipo } CsCl)$

I-4.3 INDICACIÓN DE LAS PROPORCIONES DE LOS CONSTITUYENTES

I.4.3.1 Número de átomos o de grupos

El número de átomos o grupos atómicos idénticos en una fórmula se indica con un número arábigo como subíndice derecho del símbolo o símbolos que califica (Sección I-3.4). Los símbolos pueden estar solos o entre paréntesis (), corchetes [] o llaves { }. Pueden usarse los signos de inclusión para separar símbolos a fin de evitar posibles ambigüedades.

Ejemplos:

- | | |
|--|---|
| 1. CaCl_2 | 4. $[\{\text{Fe}(\text{CO})_3\}_3(\text{CO})_2]^{2-}$ |
| 2. $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]_2(\text{SO}_4)_3$ | 5. $\text{K}[\text{Os}(\text{N})\text{O}_3]$ |
| 3. $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ | |

Las moléculas solvatantes y especies análogas en compuestos de adición (como pueden aparecer en aductos ácido-base de Lewis y en complejos moleculares de transferencia de carga) no se indican como compuestos de coordinación, salvo que puedan ser identificadas inequívocamente como tales. Sus proporciones pueden indicarse por números arábigos que anteceden a sus fórmulas. Las fórmulas de los compuestos constituyentes se separan por medio de un punto elevado (·). Para determinadas clases de compuestos, puede haber reglas específicas de ordenamiento en las fórmulas (véase, p. ej., la Sección I-4.6.8).

Ejemplos:

6. $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
7. $8\text{H}_2\text{S} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$
8. $\text{NH}_3 \cdot \text{B}(\text{CH}_3)_3$

I-4.3.2 Fases sólidas

Para las fórmulas de soluciones sólidas y fases no estequiométricas, véase el Capítulo I-6.

I-4.4 INDICACIÓN DEL ESTADO DE OXIDACIÓN Y CARGA DE LOS CONSTITUYENTES

I-4.4.1 Estados de oxidación

El estado de oxidación de un elemento en una fórmula puede indicarse por un número romano como superíndice derecho; además, el estado de oxidación cero puede representarse con el número 0. Si un elemento aparece en la misma fórmula con más de un estado de oxidación, se repite el símbolo del elemento y se asigna a cada símbolo el número romano que le corresponde, en orden creciente de magnitud y de negativo a positivo.

Ejemplos:

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

Cuando no sea factible o razonable definir un estado de oxidación para cada átomo individual de un grupo (o clúster), se recomienda expresar el estado de oxidación total del grupo por medio de una carga iónica formal, según se indica en la Sección I-4.4.2. Esto evita el uso de estados de oxidación fraccionarios (Nota 4c).

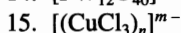
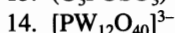
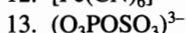
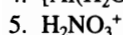
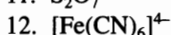
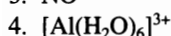
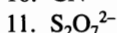
Ejemplos:



I-4.4.2 Carga iónica

La carga iónica se indica por medio de un superíndice derecho como A^{n+} o A^{n-} (no como A^{+n} ni A^{-n}) (véase la Sección I-3.4). En casos como los de iones de coordinación y estructuras extensas, $n+$ o $n-$ se usan como superíndices a la derecha del correspondiente paréntesis o corchete. Obsérvese que la presentación general cuando no se usan corchetes es $\text{X}_x\text{Y}_y^{n+}$, etc., y no $\text{X}_x\text{Y}_y^{n+}$.

Ejemplos:



I-4.4.3 Radicales libres

La IUPAC recomienda que se limite el uso del término radical a las especies llamadas convencionalmente radicales libres. En el presente contexto, se considera un radical a un átomo o grupo de átomos que tienen uno o más electrones desapareados (véase la Sección I-8.4.1). Un radical puede también estar cargado positiva o negativamente. En los compuestos de los metales de transición no suele considerarse necesario destacar la presencia de electrones desapareados y estos generalmente no se indican. Incluso en radicales de metales que no son de transición, los electrones desapareados raramente se indican formalmente. Sin embargo, cualquier carga sobre un radical debe explicitarse.

Cuando se desee especificarlo, se designa un radical con un punto como superíndice a la derecha del símbolo del elemento o grupo (Nota 4d). Las fórmulas de los radicales poliatómicos se colocan entre paréntesis y el punto como superíndice a la derecha del paréntesis. En los radicales que se tratan como compuestos de coordinación (véase el Capítulo I-10) el punto está como superíndice de los corchetes. El punto superíndice sólo indica la presencia de elec-

Nota 4c. El estado de oxidación es un método formal para asignar electrones a átomos o grupos de átomos concretos en una molécula y para comprender las reacciones redox. Las reglas originales para determinarlos no permiten valores fraccionarios. Cuando resulten estados de oxidación fraccionarios para átomos específicos de un grupo, a los que difícilmente podrían asignárseles electrones, es preferible rechazar el método de estados fraccionarios en favor del formalismo de cargas que se sugiere aquí.

Nota 4d. Este uso difiere en detalles de la práctica recomendada en la NQO, edición de 1987, Regla C-81, y en la química del estado sólido (Capítulo I-6). El uso de puntos en fórmulas estructurales, en las que es necesario especificar la posición del electrón desapareado, debería seguir la recomendación de la Regla C-81 de la NQO.

trones desapareados y no su localización. En los radicales iónicos el punto precede a la carga (Nota 4e).

Ejemplos:

- | | | |
|------------------------------------|--|--|
| 1. H [•] | 8. (CN) [•] | 15. (O ₂) ^{•-} |
| 2. Br [•] | 9. [Mn(CO) ₅] [•] | 16. (NO) ^{•-} |
| 3. ⁷ Li [•] | 10. (HgCN) [•] | 17. (Cl ₂) ^{•-} |
| 4. ²³ Na [•] | 11. (SnCl ₃) [•] | 18. (SO ₂) ^{•-} |
| 5. (NO ₂) [•] | 12. [V(CO) ₆] [•] | 19. (BH ₃) ^{•-} |
| 6. (OH) [•] | 13. (Ag ₂) ^{•+} | 20. (CO ₂) ^{•-} |
| 7. (PO) [•] | 14. (NH ₃) ^{•+} | 21. [Cr(C ₁₀ H ₇) ₂] ^{•+} |
| | | 22. [Cr(C ₁₀ H ₇) ₂] ^{•3-} |

Dos electrones desapareados se indican con dos puntos seguidos o con 2[•]. Si son más de dos, debe indicarse siempre con el superíndice *n*[•], siendo *n* ≥ 3.

Ejemplos:

23. (O₂)^{••} o (O₂)₂^{2•}
 24. (N₂)^{••2-} o (N₂)₂^{2•-}
 25. (N₂O)^{••2+} o (N₂O)₂^{2•+}
 26. [FeCl₄]^{4•2-}

En las fórmulas estructurales puede resultar útil usar el punto para indicar la ubicación del (de los) electrón(es) desapareado(s).

I-4.5 OTROS MODIFICADORES DE FÓRMULAS

I-4.5.1 Compuestos ópticamente activos

El signo del sentido de la rotación óptica se coloca entre paréntesis y la longitud de onda (en nm) se indica con un subíndice derecho. Todo el símbolo se coloca delante de la fórmula y se refiere a la línea D del sodio, salvo que se indique otra cosa (Nota 4f).

Ejemplos:

1. (+)₅₈₉[Co(NH₂CH₂CH₂NH₂)₃]Cl₃
 2. (-)₅₈₉[Co{(-)NH₂CH(CH₃)CH₂NH₂}₃]Cl₃

I-4.5.2 Estados excitados

Los estados electrónicos excitados pueden indicarse por medio de un asterisco como superíndice derecho. Este simbolismo no distingue entre diferentes estados excitados.

Nota 4e. Esta recomendación es consistente con la de la edición de 1987 de la NQO, Reglas C-83.3 y C-84.4, y con el *Compendium of Chemical Terminology*, pero difiere de la recomendación sobre espectrometría de masas, *Pure Appl. Chem.*, **50**, 56 (1978). Cuando se considere que una representación como M^{2•2-} pudiera ser confusa, se sugiere usar paréntesis, M^{(2•)2-}.

Nota 4f. La regla se describe más extensamente en la NQO, edición de 1987, Regla E-4.4.

Ejemplos:

1. He*
2. NO*

I-4.5.3 Modificadores estructurales

Modificadores tales como *cis*, *trans*, etc., se hallan en la Tabla V. Generalmente tales modificadores se usan como prefijos en bastardilla y se conectan a la fórmula con un guión.

Ejemplos:

1. *cis*-[PtCl₂(NH₃)₂]
2. *trans*-[PtCl₄(NH₃)₂]
3. *trans*-[MoCl₄(thf)₂] · *trans*-[ReCl(N₂)(PMePh)₄]

El ejemplo 3 usa la abreviatura thf para el tetrahidrofurano. La Tabla I-10.5 contiene las abreviaturas comunes; véase además la Sección I-4.6.7.2.

El modificador μ , que sirve para designar un átomo o grupo puente entre centros de coordinación, es de uso frecuente y puede considerarse un infijo. El (los) grupo(s) puente(s) se coloca(n) normalmente al final de la fórmula, modificado(s) por el prefijo μ y entre paréntesis, y en todo caso preferentemente después del átomo (o átomos) central(es) en la fórmula. Si el grupo sirve de puente entre más de dos átomos, μ puede a su vez modificarse con subíndices μ_3 , μ_4 , ..., μ_n . Si hay más de un grupo puente, éstos se citan en orden creciente de multiplicidad. Si dos o más grupos puente tienen la misma multiplicidad, el orden de citación viene dado por el orden alfabético de los símbolos. Véase el Capítulo I-2 y especialmente el I-10 para un comentario completo de los compuestos de coordinación y los usos de los modificadores estructurales.

Ejemplos:

4. [{Cr(NH₃)₅}₂](μ -OH)Cl₅
5. [Cr₃(μ -CH₃COO)₆(μ_3 -O)]Cl
6. [{Co(CN)₅}{Fe(CN)₅}](μ -CN)

I-4.6 SECUENCIA DE CITACIÓN DE LOS SÍMBOLOS

I-4.6.1 Prioridades

I-4.6.1.1 Generalidades

La secuencia de símbolos en una fórmula es siempre arbitraria y en cada caso particular puede ser cuestión de conveniencia. Por ejemplo, la secuencia usada en un índice (informático) será la apropiada para sus propias necesidades. Cuando no haya requerimientos específicos, puede usarse la guía que sigue; la Tabla I-4.1 da un resumen de la misma.

I-4.6.1.2 Electronegatividades y orden de citación

El orden de citación de los símbolos en una fórmula se basa en las electronegatividades *relativas*, citándose en primer lugar el constituyente más electropositivo. A falta de una escala

Tabla I-4.1 Asignación de fórmulas a los compuestos

-
- (i) Asignar símbolos a los constituyentes (Capítulo I-3).
 - (ii) Indicar las proporciones de los constituyentes (I-4.3).
 - (iii) Dividir los constituyentes en electropositivos y electronegativos (I-4.6.1.2). Esto requiere tomar decisiones sobre el tipo de compuesto. Hay reglas especiales para los ácidos (I-4.6.1.2), grupos poliatómicos (I-4.6.5), compuestos binarios (I-4.6.2), compuestos en cadena (I-4-6-3), compuestos intermetálicos (I-4.6.6), compuestos de coordinación (I-4.6.7) y compuestos de adición (I-4.6.8).
 - (iv) Ensamblar la fórmula (I-4.6).
 - (v) Agregar los modificadores apropiados (geométricos, etc.) (I-4.2.3, I-4.2.4, I-4.5, I-4.7).
 - (vi) Agregar los estados de oxidación, las cargas, etc., si es necesario (I-4.4).
-

universal de electronegatividades, debe usarse la Tabla IV como una guía de electronegatividades relativas. En general, los elementos que se encuentran delante del A1 en la secuencia de la Tabla IV deben considerarse como electronegativos y los que siguen al B como electropositivos. Esto no debe tomarse como una prescripción. En los compuestos binarios entre no metales (Sección I-4.6.2), en los grupos poliatómicos (Sección I-4.6.5) y en los compuestos intermetálicos (I-4.6.6) se toma como electropositivo al que se cita primero, aunque el criterio general sugiera que no lo es. En las fórmulas de los ácidos de Brønsted (véase la Sección I-5.3.2), el hidrógeno ácido se considera un constituyente electropositivo y precede a los constituyentes aniónicos.

Si el compuesto contiene más de un constituyente electropositivo o electronegativo, la secuencia dentro de cada clase es el orden alfabético de sus símbolos.

Ejemplos:

- | | |
|--|--|
| 1. KCl | 6. H[AuCl ₄] |
| 2. CaSO ₄ | 7. Na ₂ B ₄ O ₇ |
| 3. HBr | 8. NaHSO ₄ |
| 4. H ₂ SO ₄ | 9. IBrCl ₂ |
| 5. [Cr(H ₂ O) ₆]Cl ₃ | 10. O ₂ ClF ₃ |

I-4.6.1.3 Orden alfabético

Un símbolo de una letra, p. ej. B, precede siempre a un símbolo de dos con la misma letra inicial, como Be. El hidrógeno no reemplazable de un anión es un ligando que ocupa su posición alfabética normal. El hidrógeno reemplazable (ácido) se trata como se describe en la Sección I-4.6.1.2. El NH₄ se trata como un símbolo único y va después de Ne. Si los primeros símbolos son iguales, un constituyente monoatómico precede a otro poliatómico o complejo, p. ej., O⁻ precede a OH⁻. Cuando las entidades a ordenar en una fórmula son poliatómicas, el orden de citación se decide seleccionando un símbolo en particular que caracterice la entidad. En la fórmula de una entidad de coordinación o de un grupo poliatómico, el orden alfabético viene determinado por el primer símbolo, escrito de acuerdo con las Secciones I-4.6.2–I-4.6.7. Por ejemplo, SCN, UO₂, NO₃, OH y [Zn(H₂O)₆]²⁺ se ordenan por las letras, S, U, N, O y Zn respectivamente. Véase además el Capítulo I-2.

Si coinciden los primeros símbolos, se cita primero el símbolo con menor subíndice derecho, p. ej., NO₂ precede a N₂O₂. Si así no se resuelve, se toman los símbolos siguientes alfabéti-

ca y numéricamente para definir el orden; p. ej., NO₂ precede a NO₃, NH₃ precede a NO₂. El orden de citación de algunos aniones del nitrógeno es el siguiente: N³⁻, NH₂⁻, NO₂⁻, NO₃⁻, N₂O₂²⁻, N₃⁻.

Las recomendaciones contenidas en las Secciones I-4.6.1.2 y I-4.6.1.3 se ilustran con los ejemplos siguientes:

Ejemplos:

- | | |
|--|--|
| 1. KMgF ₃ | 10. Na(UO ₂) ₃ [Zn(H ₂ O) ₆](C ₂ H ₃ O ₂) ₉ |
| 2. NaTi(NO ₃) ₂ | 11. MgCl(OH) |
| 3. CaTiO ₃ | 12. VOSO ₄ |
| 4. TiZnO ₃ | 13. AlLiMn ^{IV} O ₄ (OH) ₄ |
| 5. NaNH ₄ HPO ₄ · 4H ₂ O | 14. FeO(OH) |
| 6. LiH ₂ PO ₄ | 15. ZnN ₃ OH |
| 7. KHS | 16. Co ₂ NO ₃ (OH) ₃ |
| 8. NaHPO ₃ | 17. Na ₆ ClF(SO ₄) ₂ |
| 9. K ₂ Mg ₂ V ₁₀ O ₂₈ · 16H ₂ O | 18. Pb(OH)(C ₂ H ₃ O ₂) |

Se permite la desviación del orden alfabético para resaltar similitudes entre compuestos.

Ejemplos:

19. CaTiO₃ y ZnTiO₃

I-4.6.2 Compuestos binarios entre no metales

De acuerdo con la práctica corriente, en los compuestos binarios entre no metales se coloca en primer lugar el constituyente que aparece delante en la siguiente secuencia (Nota 4g):

Rn, Xe, Kr, Ar, Ne, He, B, Si, C, Sb, As, P, N, H, Te, Se, S, At, I, Br, Cl, O, F.

Ejemplos:

- | | |
|----------------------|----------------------------------|
| 1. NH ₃ | 4. OF ₂ |
| 2. H ₂ S | 5. B ₂ H ₆ |
| 3. Cl ₂ O | 6. PH ₃ |

I-4.6.3 Compuestos en cadena

Para los compuestos en cadena que contienen tres o más elementos diferentes, la secuencia debiera estar de acuerdo con el orden en que están unidos los átomos en la molécula o ion.

Ejemplos:

1. -SCN (no CNS)
2. HOCN (ácido ciánico)
3. HONC (ácido fulmínico)
4. (O₃POSO₃)³⁻

Nota 4g. El antimonio se clasifica aquí como un no metal pero sus propiedades son intermedias entre metal y no metal. En otros contextos puede ser considerado como un metal. La secuencia indicada aquí es una modificación de la secuencia de electronegatividades.

I-4.6.4 Iones poliatómicos

Los iones poliatómicos, sean o no complejos, se tratan de manera similar. Se citan primero los átomos centrales (p. ej., I en $[\text{ICl}_4]^-$, U en UO_2^{2+} , Si y W en $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$) o característicos (p. ej., el Cl en ClO^- , O en OH^-), y después los grupos subsidiarios en orden alfabético de sus símbolos dentro de cada clase.

Ejemplos:

- | | |
|--------------------------------|--|
| 1. SO_4^{2-} | 7. $[\text{P}_2\text{W}_{18}\text{O}_{62}]^{6-}$ |
| 2. UO_2^{2+} | 8. $[\text{Mo}_6\text{O}_{18}]^{2-}$ |
| 3. NO_2^- | 9. $[\text{CrO}_7\text{S}]^{2-}$ |
| 4. ClO^- | 10. $[\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}]^{4-}$ |
| 5. OH^- (Nota 4h) | 11. $[\text{BH}_4]^-$ |
| 6. $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ | 12. $[\text{ICl}_4]^-$ |

I-4.6.5 Compuestos o grupos poliatómicos

Es necesario definir el átomo central del compuesto o grupo, que siempre se cita en primer lugar. Si hay más de dos átomos o grupos diferentes unidos a un único átomo central, el símbolo del átomo central va seguido de los símbolos de los restantes átomos o grupos en orden alfabético. La única excepción son los ácidos, en cuyas fórmulas va primero el hidrógeno. Cuando forma parte de la molécula un grupo, tal como >P=O , que aparece repetidamente en diferentes compuestos, tal grupo puede ser considerado como la parte positiva del compuesto.

Ejemplos:

- | | |
|---|---|
| 1. PBrCl_2 | 4. PSCl_3 o PCl_3S |
| 2. SbCl_2F | 5. H_3PO_4 |
| 3. POCl_3 o PCl_3O | |

I-4.6.6 Compuestos intermetálicos

Los constituyentes (incluyendo el antimonio) se colocan en orden alfabético de sus símbolos. Se permiten desviaciones de tal orden, por ejemplo, para resaltar el carácter iónico, o cuando se comparan compuestos con estructuras análogas, pero de no existir consideraciones ineludibles debe seguirse el orden alfabético.

Ejemplos:

- | | | |
|---------------------------|-----------------------------|--------------------------|
| 1. Au_2Bi | 4. Cu_5Zn_8 | } (estructuras análogas) |
| 2. NiSn | 5. Cu_5Cd_8 | |
| 3. Mg_2Pb | 6. Na_3Bi_5 | (carácter iónico) |

Nota 4h. El ion hidróxido se representa por el símbolo OH^- , aunque las recomendaciones sobre las fórmulas de los ácidos (ver la Sección I-4.6.1.2 y el Capítulo I-9) indicarían poner HO^- . El ejemplo 5 está de acuerdo con la práctica mayoritaria

I-4.6.7 Compuestos de coordinación

I-4.6.7.1 Resumen de los formalismos usados

El Capítulo I-10 trata sobre la nomenclatura de los compuestos de coordinación. Sus fórmulas se tratan como las de los restantes grupos poliatómicos. En la fórmula de una entidad de coordinación, el símbolo del átomo central (o los de los átomos centrales) se coloca el primero, seguido por los ligandos iónicos y luego los neutros. El orden de citación de los átomos centrales sigue el orden alfabético de sus símbolos. Los ligandos se citan alfabéticamente dentro de cada clase, de acuerdo con el primer símbolo de sus fórmulas, escritas según se indica en las Secciones I-4.6.1 a I-4.6.5. Así, H_2O , NH_3 , SiH_3^- , NO_3^- , SO_4^{2-} y OH^- se citan en H, N, Si, N, S y O, y los ligandos que contienen sólo carbono e hidrógeno se citan en la C. Los ligandos orgánicos que contienen heteroátomos (átomos distintos de carbono e hidrógeno) se citan de acuerdo con el sistema orgánico, según el cual el C y el H preceden a los otros átomos, que les siguen por orden alfabético. La posición de la fórmula del ligando orgánico en la secuencia de citación está determinada por el orden alfabético de los heteroátomos. Si dos ligandos tienen el mismo heteroátomo, el que tiene menor número de tales átomos precede al que tiene más. Si los números de tales heteroátomos son iguales, la secuencia se define por los átomos *subsiguientes*. Por ejemplo, $\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ y $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$ se citan en P y N; $\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$ precede a NH_3 ; y $\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2$ precede a $\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2$.

Toda la entidad de coordinación se encierra entre corchetes, lleve o no carga. Esta norma no es obligatoria para especies sencillas, como los oxoaniones comunes (NO_3^- , NO_2^- , SO_4^{2-} , OH^- , etc.). Los signos de inclusión se ordenan dentro de los corchetes como sigue: $[()]$, $[\{()\}]$, $[\{[()]\}]$, etc.

La fórmula estructural de un ligando ocupa el mismo lugar que ocuparía su fórmula molecular en una secuencia.

Las moléculas NO y CO unidas a átomos metálicos se consideran ligandos neutros, a efectos de nomenclatura.

Ejemplos:

1. $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$
2. $\text{K}_2[\text{OsCl}_5\text{N}]$
3. $[\text{Co}(\text{N}_3)(\text{NH}_3)_5]\text{SO}_4$
4. $[\text{Al}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$
5. $\text{K}_2[\text{Cr}(\text{CN})_2\text{O}_2(\text{O}_2)\text{NH}_3]$
6. $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5(\text{N}_2)]\text{Cl}_2$
7. *cis*- $[\text{PtCl}_2\{\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3\}_2]$
8. $\text{Na}[\text{PtBrCl}(\text{NO}_2)\text{NH}_3]$
9. $[\text{PtCl}_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})\text{NH}_3]$
10. $[\text{Co}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]^{3+}$

I-4.6.7.2 Abreviaturas

Éstas pueden usarse para representar ligandos en fórmulas y se sitúan en el mismo lugar que la fórmula que representan. Las abreviaturas deben escribirse con minúsculas y entre paréntesis. Las abreviaturas más comúnmente usadas están en la Tabla I-10.5 y en la Tabla X.

Ejemplos:

1. $[\text{Pt}(\text{py})_4][\text{PtCl}_4]$
2. $[\text{Fe}(\text{en})_3][\text{Fe}(\text{CO})_4]$
3. $[\text{Co}(\text{en})_2(\text{bpy})]^{3+}$ o $[\text{Co}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]^{3+}$

Las abreviaturas habituales de los grupos orgánicos, tales como Me, Ph, Bu, etc., son aceptables en las fórmulas inorgánicas. Obsérvese que debe respetarse la diferencia entre un anión y

su ácido originario. Así "acac" es una abreviatura aceptable para el acetilacetato. La acetilacetona (pentano-2,4-diona), en cambio, pasa a ser "Hacac" (véase la Tabla I-10.5 y la Tabla X). El no seguir estos convenios conduce a inconsistencias y a la necesidad de subíndices negativos para mostrar la ausencia de átomos. Tales prácticas no se recomiendan.

I-4.6.8 Compuestos de adición

En las fórmulas de los compuestos de adición, las moléculas componentes se citan en orden creciente de su número; si están en igual número, se ordenan alfabéticamente por su primer símbolo. Se exceptúan los compuestos de adición que contienen derivados de boro o agua, en los cuales el agua o el compuesto de boro se citan al final. Si están ambos presentes, el boro antecede al agua. Esta es una práctica tradicional para los hidratos.

Ejemplos:

- | | |
|--|--|
| 1. $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ | 5. $8\text{H}_2\text{S} \cdot 46\text{H}_2\text{O}$ |
| 2. $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ | 6. $\text{C}_6\text{H}_6 \cdot \text{NH}_3 \cdot \text{Ni}(\text{CN})_2$ |
| 3. $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot \text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 24\text{H}_2\text{O}$ | 7. $2\text{CH}_3\text{OH} \cdot \text{BF}_3$ |
| 4. $\text{AlCl}_3 \cdot 4\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ | 8. $\text{BF}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ |

I-4.7 COMPUESTOS MODIFICADOS ISOTÓPICAMENTE (Nota 4i)

I-4.7.1 Formalismo general

El número de masa de cualquier nucleido dado puede indicarse en la forma habitual, con un superíndice izquierdo delante del símbolo atómico correspondiente (Sección I-3.4).

Cuando es necesario citar diferentes nucleidos en un mismo lugar de una fórmula, los símbolos de los nucleidos se escriben en orden alfabético y, cuando sus símbolos son idénticos, en orden creciente de su masa. Los compuestos isotópicamente modificados pueden clasificarse en *sustituidos isotópicamente* y en *marcados isotópicamente* (Nota 4i).

I-4.7.2 Compuestos sustituidos isotópicamente

Un compuesto sustituido isotópicamente tiene una composición tal que todas las moléculas del compuesto tienen sólo el (o los) nucleido(s) indicado(s) en cada posición señalada. Los nucleidos sustituidos se señalan insertando el número de masa como superíndice izquierdo de cada símbolo en la fórmula normal.

Nota 4i. Para más detalles, ver "Isotopically Modified Compounds", *Pure Appl. Chem.*, **53**, 1887 (1981).

Ejemplos:

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

I-4.7.3 Compuestos marcados isotópicamente

I-4.7.3.1 Tipos de marcación

Un compuesto isotópicamente marcado puede considerarse formalmente como una mezcla de un compuesto no modificado isotópicamente y uno o más compuestos análogos sustituidos isotópicamente. Pueden dividirse a su vez en varios grupos diferentes. Aquí se tratan los compuestos marcados específicamente y los marcados selectivamente.

I-4.7.3.2 Compuestos marcados específicamente

Un compuesto marcado isotópicamente se llama marcado específicamente cuando un compuesto con sustitución isotópica específica se agrega formalmente a un compuesto análogo no modificado. El compuesto específicamente marcado se indica encerrando entre corchetes el símbolo del (o los) nucleido(s) con sus subíndices multiplicadores (si los hay).

Ejemplos:

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

I-4.7.3.3 Compuestos marcados selectivamente

Un compuesto marcado selectivamente puede considerarse como una mezcla de compuestos marcados específicamente. Esto se indica colocando entre corchetes, delante de la fórmula, el símbolo del nucleido, precedido de localizadores si es necesario, pero sin subíndices.

Ejemplos:

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

El número de posibles marcaciones para una posición dada, puede indicarse por subíndices, separados por punto y coma, agregados al símbolo atómico del indicador isotópico, dentro del corchete.

Ejemplo:

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

I-4.8 OBSERVACIONES FINALES

Las recomendaciones que anteceden intentan ser una guía y exponer los principios básicos sobre los que deben construirse las fórmulas. La Tabla I-4.1 es una orientación general para el uso de este Capítulo. Sin embargo, a menudo no se pueden separar las reglas relativas a las fórmulas de aquéllas relativas a los nombres. En consecuencia, los interesados deben remitirse a Capítulos o documentos más especializados para informarse sobre tipos de compuestos específicos; por ejemplo, el Capítulo I-10 para los compuestos de coordinación o la Nota 4i para los modificados isotópicamente. Los principios expuestos aquí pretenden ser de aplicación general.