Supondo que, a uma dada temperatura T, o estado eletrônico seja o fundamental (denominado I) teremos que os núcleos vibram de acordo com o potencial $E_I(R)$ e podemos em princípio calcular, por exemplo através do Método Variacional da Mecânica Estatística, os valores médios térmicos $R_I \equiv \langle R \rangle_I(T)$, $E_I \equiv \langle E_I(R) \rangle_I(T)$ e $d_I \equiv \langle d \rangle_I(T) = \langle F [\phi_I(r;R)] \rangle_I(T)$ (os dois últimos não deveriam apresentar um comportamento muito diferente de $E_I(R_I)$ e $F [\phi_I(r,R_I)]$ respectivamente). Se o estado eletrônico for excitado (denominado II) poderemos analogamente calcular R_{II} , E_{II} e d_{II} , e finalmente as médias

$$\langle R \rangle = R_I P_I + R_{II} P_{II}$$

 $\langle E \rangle = E_I P_I + E_{II} P_{II}$
 $\langle d \rangle = d_I P_I + d_{II} P_{II}$

onde P_{I} (P_{II}) é a probabilidade de ter o estado eletrônico fundamental (excitado); se o estado eletrônico excitado for único temos naturalmente P_{I} + P_{II} = 1; no limite clássico temos $P_{i} \propto e^{-E_{i}/k_{B}T}$ (i=I, II).

A efetivação dos cálculos para um caso concreto poderá em particular mostrar se sim ou não <R>el<d>apresentam um comportamento térmico do tipo apresentado na Fig. 3. É oportuno chamar a atenção sobre o fato que nada essencial é alterado neste quadro se não existirem estados eletrônicos excitados (neste caso $P_{I}=1$). Para o cálculo das médias térmicas no contexto do Método Variacional parece-nos conveniente o uso, para a energia potencial variacional $\overline{E}(R)$, de uma das duas alternativas seguintes:

$$\overline{E}(R) = V_0 + C(R-R_0)^2$$

(onde $V_0 \le 0$, C>0/ e $R_0 > 0$ são os parâmetros variacionais)

ou
$$\overline{E}(R) = \begin{cases} + \infty & \text{se } R < R_0 \\ V_0 & \text{se } R_0 < R < R_1 \\ O & \text{se } R > R_1 \end{cases}$$

(onde $V_0 < 0$, $R_0 > 0$ e $R_1 > 0$ são os parâmetros variacionais).

Conclusão:

O tipo de tratamento teórico sugerido no parágrafo anterior supõe implicitamente o seguinte quadro: à temperatura nula o sistema encontra-se no estado eletrônico e vibracional fundamental (a estrutura fina rotacional pode ser ignorada numa primeira aproximação), ao aumentar um pouco a temperatura, começam a ser excitados os estados vibracionais associados ao estado eletrônico fundamental, transições para o estado eletrônico excitado sendo frequentes só para temperaturas ainda maiores; quando tais transições acontecem, elas são, pelo princípio de Franck e Condon, "verticais" (ver Fig. 4). A presente proposta de cálculo exige que, após uma tal transição, o sistema se termalize rapidamente adquirindo uma distância internuclear que seja aquela associada ao equilíbrio térmico. Esta restrição deveria ser levada em conta na hora de escolher uma molécula concreta para efetivar os cálculos.

Podemos concluir mencionando que a presente proposta não parece esconder aspectos operacionais de uma grande complexidade (pelo menos na aproximação grosseira aqui apresentada), e se ela contribuir, através de uma certa unificação, para aproximar mais um pouco a Química Teórica da Teoria dos Fenômenos Críticos, teremos atingido plenamente o nosso objetivo.

É com prazer que agradeço aos Professores Ricardo Ferreira e Diana Guenzburger por diversos esclarecimentos e por me terem estimulado a tornar públicas as idéias aqui expostas, apesar de sua elaboração insuficiente.

Referências:

- ¹ D. P. Landau, Phys. Rev. B. 22, 2450 (1980).
- ² F. L. Pilar, "Elementary Quantum Chemistry" (Mc Graw-Hill, 1968); (a) páginas 637-40; (b) Capítulo 15.
- ³ H. Brandi, sugestão durante o I Simpósio de Química Teórica do Rio de Janeiro.

ARTIGO

NOMENCLATURA DE COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO: UMA PROPOSTA SIMPLIFICADA

Ana M. da C. Ferreira e Henrique E. Toma

Instituto de Química da Universidade de São Paulo (USP)

Antonio C. Massabni

Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista (UNESP)

Recebido em 27/07/83

1. INTRODUÇÃO

Os problemas de nomenclatura química estão em constante renovação, como a própria ciência. Antes de Werner, era normal designar os compostos de elementos metálicos pelas suas cores; por exemplo, flavo (marrom), lúteo (amarelo), práseo (verde), róseo (vermelho-rosa), purpúreo (ver-

melho-púrpura) e vióleo (violeta). A partir de 1897, essa forma primitiva de nomenclatura, introduzida por Fremy¹, deu lugar a um sistema muito mais elaborado, proposto por Werner². Transmitindo um pensamento original em sua época, a nomenclatura de Werner baseou-se no conceito de coordenação, permitindo diferenciar os diversos tipos

de isomeria nos complexos. Esse sistema continua em uso até o presente, porém incorporando inúmeras alterações ditadas pelo desenvolvimento da química de coordenação.

A evolução das formas de nomenclatura desde a época de Werner até 1966 foi abordada por Fernelius³ em publicação dedicada ao centenário daquele grande inovador. A nível internacional, as regras de nomenclatura somente vieram a ser formalizadas em 1957 pela IUPAC⁴. Essas regras sofreram inovações em 1971, mantendo-se inalteradas até o presente⁵.

No Brasil, conforme ressalta Bicca de Alencastro⁶, sempre foram feitos esforços, isolados, visando a adaptação das regras de nomenclatura à língua portuguesa. Na química inorgânica os trabalhos primordiais nesse sentido remontam à década de 30, com ensaios e propostas de autoria de Rheinboldt⁷, Fonseca⁸, Furia⁹ e outros. Quando as regras de nomenclatura foram formalizadas pela IUPAC em 1957, versões adaptadas para a língua portuguesa foram publicadas por Krauledat¹⁰. Com as regras da IUPAC de 1971, as normas existentes na língua pátria tornaram-se parcialmente obsoletas. Desde então, a atualização das regras de nomenclatura tem sido feita em âmbito restrito, através de publicações internas nos cursos de graduação da USP a partir de 1972, e em outras instituições, particularmente do Estado de São Paulo.

O presente artigo encerra uma proposta de nomenclatura de compostos de coordenação, baseada nas regras da IUPAC de 1971, para utilização em nosso país. Em sua formulação foram perseguidos pontos essenciais, como clareza, funcionalidade e abrangência, procurando formas coerentes com o vocabulário ortográfico da Língua Portuguesa, e limitando neologismos desnecessários. Como proposta, nossa ênfase recaiu sobre aspectos mais importantes e gerais da nomenclatura, permanecendo entretanto, aberta à crítica e sugestões por parte da comunidade científica.

2. REGRAS DE NOMENCLATURA

Antes da proposição das regras de nomenclatura, em português, para os compostos de coordenação, deve-se estabelecer a formulação correta de tais compostos. Os compostos de coordenação tratados aqui são aqueles que envolvem um elemento central (metal ou não) cercado por ligantes, constituindo a esfera de coordenação. Os complexos podem ser monômeros ou polímeros.

- I. Fórmulas. As fórmulas de coordenação constituem o meio mais simples de se designar a composição dos complexos. Tais fórmulas também são freqüentemente empregadas para mostrar detalhes estruturais ou aspectos de interesse comparativo, devendo ser escritas da maneira mais conveniente possível. Nos casos gerais a seguinte ordem é recomendada:
- a) Coloca-se primeiro o símbolo do átomo central, seguido das fórmulas ou abreviações dos ligantes iônicos e depois dos ligantes neutros. A fórmula do complexo é depois encerrada entre colchetes, colocando-se como expoente sua carga, quando se tratar de espécie iônica.

b) Dentro de cada classe de ligante, as espécies são colocadas em ordem alfabética em relação ao símbolo do átomo ligante.

Exemplos:

$$[CoN_3(NH_3)_5]^{2+}$$
, $[PtCl_3(C_2H_4)]^+$, $[CoCl_2(NH_3)_4]^+$, $[CoH(N_2) \{(C_6H_5)_3P\}_3]$, $[OsCl_5N]^2$

- c) Os sinais, parênteses, chaves e colchetes, devem ser empregados nesta ordem, isto é [{()}], para englobar um conjunto de grupos idênticos e para evitar confusões nas fórmulas. Os ligantes com mais de um átomo são colocados sempre entre parênteses (ou chaves) nas fórmulas de coordenação.
- II. Nomenclatura. Nos nomes dos compostos de coordenação o nome do ânion deve preceder o do cátion e o átomo central é citado após o(s) do(s) ligante(s).
- a) Multiplicativos. Os multiplicativos simples, mono, di, tri, tetra, penta, hexa, hepta, etc., são normalmente usados para indicar o número de grupos idênticos coordenados. Eles também são utilizados para indicar o número de átomos do elemento central.

Exemplos:

 K_2 [Fe₂S₂(NO)₄] dissulfetotetranitrosildiferrato(II) de potássio

Os multiplicativos bis, tris, tetrakis, pentakis, etc., são utilizados para evitar ambigüidades, especialmente no caso de ligantes que apresentam maior complexidade.

Exemplo:

Neste caso procurou-se evitar a ambigüidade com trimetilamina, $(CH_3)_3N$, quando se quer escrever três vezes metilamina.

b) Uso de parênteses, chaves e colchetes nos nomes dos complexos. A justaposição de nomes pode prejudicar a clareza ou conduzir a formas incorretas do ponto de vista ortográfico. Por exemplo:

Neste caso a colocação de parênteses em metilamina torna-se imprescindível para evitar a ambigüidade com triclorometilamina. Assim, o nome correto seria:

· diamintricloro(metilamina)cobalto(III).

Outro exemplo:

 $[Ru(HPO_4)_2(OH)_2(NH_3)_2]^{3-}$

ion diamindihidrogenofosfatodihidroxirutenato(III).

Neste exemplo existem duas letras h no interior do nome, e uma letra r precedida de vogal, o que está em desacordo com as regras de ortografia da língua portuguesa. A forma correta implicaria na supressão dos h e na duplicação do r, como em:

diamindiidrogenofosfatodiidroxirrutenato(III).

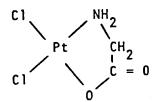
É preferível, entretanto, por uma questão de clareza, preservar a identidade dos constituintes através de parênteses:

diaminbis(hidrogenofosfato)di(hidroxi)rutenato(III).

Nesses casos, o uso de parênteses deve prevalecer sobre o hífen, cujo emprego tem melhor utilidade na nomenclatura orgânica ou na designação de isômeros. Em casos de nomes mais complicados, além dos parênteses, podem ser usados colchetes e chaves, nesta ordem preferencial.

c) Letras. São usadas geralmente para designar o elemento heterogêneo da cadeia onde ocorre a substituição no ligante e para designar o sítio ativo de coordenação quando o ligante for capaz de se coordenar através de diferentes átomos.

Exemplos:



íon dicloro(glicinato-N,O)platinato (II)

dicloro[N,N-dimetil,2,2'-tiobis(etilamina)-N',S]platina(II)

Nestes dois exemplos as letras designativas da coordenação foram colocadas *após* o nome do ligante para evitar ambigüidades introduzidas pelos substituintes.

d) Números. Quando se trata de ligantes orgânicos os algarismos arábicos são usados para designar os átomos do ligante onde ocorre substituição, seguindo-se as regras de nomenclatura dos compostos orgânicos.

Exemplo:

[PtCl₂-[H₂NCH₂CH(NH₂)CH₂NH₃]-]+

íon dicloro(2,3-diaminopropilamônio)platina(II)

Tanto os algarismos arábicos como os romanos podem ser utilizados para indicar o número de oxidação do átomo central (vide item III, a seguir).

III. Indicação do número de oxidação. O estado de oxidação do átomo central é indicado por algarismos romanos entre parênteses, logo após o nome do cátion ou ânion complexo, segundo a nomenclatura formulada por Stock¹¹. O número de oxidação zero é indicado por (0).

Exemplos:

K₃[Fe(CN)₆] hexacianoferrato(III) de potássio
[Co(NH₃)₆]Cl₃ cloreto de hexaamincobalto(III)
[Fe(CO)₅] pentacarbonilferro(0)

Havendo dúvida quanto ao estado de oxidação do elemento central, é conveniente utilizar a proposição de Ewens-Bassett¹², colocando a carga iônica total do complexo em algarismos arábicos (excluindo-se o zero) entre parênteses no final do nome.

Exemplos:

Na₂[Fe(CN)₅NO] pentaciano(nitrosil)ferrato(2-) de sódio

K₂[Fe₂S₂(NO)₄] tetranitrosilditiodiferrato(2-) de potássio ou dissulfetotetranitrosildiferrato(2-) de potássio

IV. Terminação. Espécies aniônicas complexas recebem o sufixo característico ato. Espécies neutras ou catiônicas não recebem terminação adicional.

Exemplos:

K₄[Ru(CN)₆] hexa(ciano)rutenato(II) de potássio [Ru(NH₃)₆]Cl₃ cloreto de hexaaminrutênio(III)

V. Ordem de citação dos ligantes. Os ligantes são citados em ordem alfabética, justapondo-se os nomes de todos os ligantes e do átomo central, numa palavra só. O nome de um ligante é tratado como uma unidade e, assim, "diamin" é citado sob a letra "a" e "dimetilamina" sob a letra "d".

Exemplos:

[Co(NH₂)₂(NH₃)₄]OC₂H₅
etóxido de diamidetotetraamincobalto (III)
NH₄[Cr(NCS)₄(NH₃)₂]
diamintetra (isotiocianato)cromato(III) de amônio

K₂[Cr(CN)₂O₂(O₂)NH₃]
amindicianodioxoperoxocromato(VI) de potássio

Neste último exemplo deve-se observar dois tipos de ânions derivados do oxigênio e coordenados: um é o $O^{2-}(oxo)$ e o outro $O^{2-}(peroxo)$.

VI. Nomes dos ligantes. Ao se designar os ligantes aniônicos orgânicos ou inorgânicos o sufixo "o" é sempre utilizado. Os seguintes ânions sofrem modificação na terminação:

	íon	ligante
F-	fluoreto	fluoro
Cl-	cloreto	cloro
Br-	brometo	bromo
I-	iodeto	iodo
O ²⁻	óxido	охо
OH-	hidróxido	hidroxo
O_2^{2-}	peróxido	peroxo
HO ₂	hidrogenoperóxido	hidrogenoperoxo
HS-	hidrogenossulfeto	mercapto
S^{2-}	sulfeto	tio
CN-	cianeto	ciano
CH ₃ O	metóxido	metoxo

Para os ligantes H⁻, NH₂⁻, NH²⁻ e N₃⁻ a denominação usual, hidreto, amideto, imideto e azoteto, respectivamente, é preferível em relação a hidro, amido, imido ou azido, por razões de ambigüidade. Observe-se que, em português, os nomes dos haletos coordenados, com exceção de F⁻, correspondem aos nomes dos elementos: cloro, bromo e iodo.

Ligantes aniônicos contendo prefixos numéricos (como trifosfato), assim como os tio-, seleno- e teluro- derivados dos oxi-ânions (como tiossulfato), devem ser colocados entre parênteses.

Exemplos:

K[AuS(S ₂)]	dissulfetotioaurato(III) de potássio
$[Ru(HSO_3)_2(NH_3)_4]$	tetraaminbis(hidrogenossulfito) rutênio(II)
$Na_3[Ag(S_2O_3)_2]$	bis(tiossulfato)argentato(I) de sódio
[CoN ₃ (NH ₃) ₅]SO ₄	sulfato de penta(amin)azotetoco- balto(III)
K ₂ [OsCl ₅ N]	pentacloronitretoosmato(VI) de potássio
$Na[B(NO_3)_4]$	tetra(nitrato)borato(III) de sódio
$[CoH(N_2) \{ (C_6H_5)_3P \}$	dinitrogênio(hidreto)tris(tri- fenilfosfina)cobalto(I)

VII. Nomes dos Radicais. Embora a maioria dos radicais se comporte como ânion nos compostos de coordenação, sua presença é indicada mantendo-se o nome original, sem alteração na terminação.

Exemplos:

 $[Fe(C_5H_5)_2]$ bis $(\eta^5$ -ciclopentadienil)ferro(0)

$K[B(C_6H_5)_4]$	tetrafenilborato(III) de potássio
$K[Cu(C_2H)_3]$	tris(etinil)cuprato(II) de potássio
[Fe(C ₂ C ₆ H ₅) ₂ (CO) ₄]	tetracarbonilbis(feniletinil) ferro(II)
$[\operatorname{Cr}(\operatorname{C}_6\operatorname{H}_5\operatorname{NC})_6]$	hexakis(fenilisocianeto)crômio (0)

VIII. Ligantes derivados de compostos orgânicos. Os ligantes derivados de compostos orgânicos (ácidos e fenóis, por exemplo) pela perda de prótons recebem a terminação ato e devem vir sempre dentro de parênteses. Ex.: (benzoato), (p-clorofenolato), etc. Quando o composto orgânico forma ligantes com diferentes cargas, pela perda de um número variável de prótons, a carga poderá ser indicada entre parênteses após o nome do ligante. Geralmente é preferível a utilização do prefixo hidrogeno precedido de multiplicativo. Exemplos: tartarato(3-) ou hidrogenotartarato, tartarato(2-) ou di(hidrogeno)tartarato.

Embora haja uma tendência para o uso de nomes triviais, já há muito tempo empregados para certos compostos orgânicos, recomenda-se a uniformização através das "Regras Definitivas para a Nomenclatura na Química Orgânica (IUPAC)" 13.

$[Ni(C_4H_7N_2O_2)_2]$	bis(2,3-butanodionadioximato) níquel(II) (nome trivial do ligante: dimetil- glioximato)
$[Cu(C_5H_7O_2)_2]$	bis(2,4-pentanodionato)cobre(II) (nome trivial do ligante: acetilacetonato)
$[\operatorname{CoCl}_2(\operatorname{C}_4\operatorname{H}_8\operatorname{N}_2\operatorname{O}_2)_2]$	bis(2,3-butanodionadioxima)di- clorocobalto(II) (nome trivial do ligante: dimetil- glioxima)

IX. Ligantes Neutros e Catiônicos. O nome de uma molécula neutra coordenada deve ser usado sem alteração, exceto nos casos: H_2O , NH_3 , NO, CO, CS e NS que são denominados aqua, amin, nitrosil, carbonil, tiocarbonil e tionitrosil, respectivamente. Os elementos N_2 e O_2 coordenados são chamados de dinitrogênio e dioxigênio, respectivamente, e são escritos entre parênteses na fórmula e no nome do complexo.

Exemplos:

[Ni(CO) ₂ {(C ₆ H ₅) ₃ P} ₂]	dicarbonilbis(trifenilfosfina) níquel(0)
[Fe(en) ₃][Fe(CO) ₄]	tetracarbonilferrato(—II) de tris(etilenodiamina)ferro(II)
$[Ir(CO)_2(NO)(O_2)]$	dicarbonil(dioxigênio)nitrosi- lirídio(0)
[Ru(N ₂)(NH ₃) ₅]Cl ₂	cloreto de pentaamin(dinitro- gênio)rutênio(II)

K[Co(CN)(CO)₂(NO)] dicarbonilcianonitrosilcobaltato(1⁻) de potássio

[Al(OH)(H₂O)₅]²⁺ fon pentaaqua(hidroxo)alumínio(III)

[CoCl₃(NH₃)₂{(CH₃)₂NH}] diamintricloro(dimetilamina)cobalto(III)

[CoH(CO)₄] tetracarbonil(hidreto)cobalto
(I)

O nome de um ligante catiônico coordenado é usado sem alteração, se não houver ambigüidade.

Exemplo:

[PtCl₂ {H₂NCH₂CH(NH₂)CH₂NH₃}]Cl

cloreto de dicloro(2,3-diaminopropilamônio)platina(II)

- X. Abreviações usadas para os ligantes. As seguintes recomendações se aplicam ao uso das abreviações:
- a) Quando se tratar de publicações, o significado de cada abreviação deve ser escrito por extenso. Ex.: en etilenodiamina.
- b) As abreviações devem ser curtas, não mais que 4 letras, e não devem conter hífens. Ex.: phen e não o-phen (para 1,10-fenantrolina).
- c) Deve-se procurar evitar confusões com abreviações comumente aceitas, como Me (metil), Et (etil), Ph (fenil), etc.
- d) Com exceção de algumas abreviações do tipo H_4 edta, H_2 ox e L, todas as abreviações devem ser feitas com letras minúsculas. Ex.: en, tren, py, bipy, etc. A abreviação genérica para metal é M.
- e) As seguintes abreviações são as mais comumente utilizadas:

acetilacetona, CH₃COCH₂COCH₃ Hacac acetilacetonato, CH3 COCHCOCH3 acac H₄ edta ácido etilenodiaminatetraacético, (HOOCCH₂)₂ NCH₂CH₂N(CH₂COOH)₂ dmg dimetilglioximato, CH₃C(=NO)C(=NO)CH₃² H₂dmg dimetilglioxima, CH₃C(=NOH)C(=NOH)CH₃ oxalato, "OOC - COO" ΩX piridina, C5 H5 N ру 2,2'-bipiridina, bipy phen 1,10-fenantrolina, 1,2-diaminoetano ou etilenodiamina, en H₂NCH₂CH₂NH₂ propilenodiamina, H2NCH(CH3)CH2NH2 pn dien dietilenotriamina,

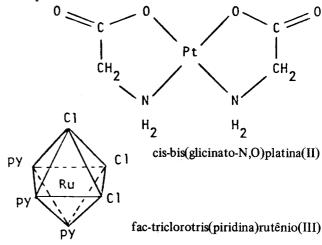
H2NCH2CH2NHCH2CH2NH2

2,2',2"-triaminotrietilamina, (H₂NCH₂CH₂)₃N tren trien trietilenotetraamina, (H2 NCH2 CH2 NHCH2)2 glicinato, NH2CH2COOgly ditioxamida, HSC(=NH)C(=NH)SH dtox dimetilssulfóxido, (CH₃)₂SO dmso dimetilformamida, HCON(CH₃)₂ dmf uréia, (H2N)2CO ur o-fenilenobis(dimetilarsina), (CH₃)₂ AsC₆H₄ As diars

XI. Designação de Isômeros. Isômeros geométricos são indicados normalmente pelos prefixos cis- e trans-. No caso de compostos do tipo MX₃Y₃ os prefixos fac- e mer- são usados quando os três ligantes iguais estão na mesma face ou não, respectivamente (fac = facial e mer = meridional).

Exemplos:

 $(CH_3)_2$



A isomeria proveniente da ligação por meio de diferentes átomos do ligante pode ser designada no próprio nome do ligante ou indicando o átomo que participa da ligação.

Exemplos:

A designação dos isômeros ópticos é feita pelo sinal de rotação, num dado comprimento de onda, (+) ou (-). Para a mistura racêmica, o prefixo rac- pode ser utilizado.

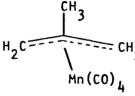
Exemplo:

$$(+)_{589}[Co(en)_3]I_3 e (-)_{589}[Co(en)_3]I_3$$

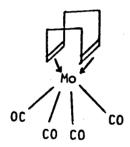
XII. Complexos com moléculas ou grupos insaturados. O ligante é designado da maneira usual, se apenas a composição estequiométrica do composto é indicada na fórmula. Para designar a estrutura onde vários átomos de uma cadeia, ou de um anel no caso de ligações- π , estão ligadas ao átomo central, utiliza-se a letra η (leia-se eta ou hapto) como prefixo do nome do ligante. Se apenas alguns átomos ligantes envolvidos em ligações duplas estão coordenados ao átomo central são usados números designativos da posição da insaturação precedendo a letra η .

Exemplos:

[PtCl₂(C₂H₄)(NH₃)] amindicloro(η -etileno)platina(II) [Cr(C₆H₆)₂] bis(η ⁶-benzeno)crômio(0)



tetracarbonil[1-3-n(2-metilalil)]manganês(I)



tetracarbonil(η -1,5-ciclooctadieno)molibdênio(0)

XIII. Compostos bi- e polinucleares com ligações através de pontes. Nos complexos binucleares ou polinucleares, os ligantes que funcionarem como conectivos ou pontes entre dois ou mais átomos centrais são indicados pela letra grega μ , como um prefixo do nome do ligante, separado por hífen. Dois ou mais ligantes de conexão são indicados por di- μ , tri- μ , etc. Para uma espécie que liga mais de dois átomos centrais, o número de átomos ligados é indicado como um subíndice da letra (por exemplo, μ_3).

Exemplos:

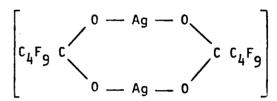
 $[(NH_3)_5Cr-OH-Cr(NH_3)_5]Cl_5$ cloreto de μ -hidroxobis [pentaamincrômio(III)]

[Be₄O(CH₃COO)₆] hexa- μ -(acetato-0,0')- μ ₄-oxotetra-berflio(II)

Para grupos de conexão ligados a dois centros através de átomos coordenantes diferentes, os símbolos desses átomos são especificados após o nome do ligante.

Exemplos:

íon hexaamindi-μ-hidroxo-μ-(nitrito-0,N) dicobalto(III)



bis(µ-nonafluorovalerato-0,0')diprata(I)

Se o mesmo ligante estiver presente como ligante de conexão e ligante comum, ele é citado primeiro como ligante de conexão.

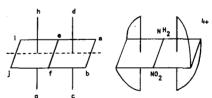
Exemplo:

$$[(CO)_3Fe(CO)_3Fe(CO)_3]$$

tri-µ-carbonilbis[tricarbonilferro(O)]

Para estruturas mais complicadas, são utilizadas letras minúsculas para designar a posição exata dos ligantes.

Exemplo:



representa $H_2NCH_2CH_2NH_2 = en$ fon $e-\mu$ -amideto-ac,bd,gj,hi-tetrakis(etilenodiamina)f- μ -ni-trodicobalto(III).

XIV. Estruturas Poliméricas. Para estruturas com extensão indefinida o nome é baseado na unidade de repetição, utilizando a denominação catena antes do nome.

Exemplos:

$$\begin{aligned} & \text{CsCuCl}_3 = (\text{Cs}^+)_n [(\text{CuCl}_3)_n]^{n^-} \\ & \text{Cl} & \text{Cl} & \text{Cl} \\ & | & | & | \\ \dots \text{Cl} & -\text{Cu} & -\text{Cl} & -\text{Cu} & -\text{Cl} & -\text{Cu} \dots \\ & | & | & | & | \\ & \text{Cl} & \text{Cl} & \text{Cl} & \text{Cl} \end{aligned}$$

catena-µ-cloro-diclorocuprato(II) de césio

catena-di-µ-cloropaládio(II)

XV. Compostos bi- e polinucleares sem ligações através de pontes. Quando simétricos, são utilizados prefixos multiplicativos e quando assimétricos, um dos átomos centrais com seus ligantes é considerado como sendo um ligante do outro átomo central.

Exemplos:

[Br₄Re - ReBr₄]² fon bis[tetra(bromo)renato(III)] [(CO)₅Mn - Mn(CO)₅] bis[pentacarbonilmanganês(0)] [-{(C₆H₅)₃As}-AuMn(CO)₅] pentacarbonil[(trifenilar-sina)ouro(0)]manganês(0)

Quando houver ligações através de pontes, além de ligações metal-metal entre o mesmo par de átomos, o complexo é designado como um composto somente com ligações através de pontes. Quando necessário, ou se desejado, a existência da ligação metal-metal é indicada entre parênteses, em itálico, no final do nome.

Exemplo:

 $[(CO)_3Co(CO)_2Co(CO)_3]$

di-µ-carbonil-bis[tricarbonilcobalto(0)]Co-Co

Referências:

- ¹ E. Frémy, Ann. Chim. Phys. 35, 227 (1852); ibidem, J. Prakt. Chem. 227, 237 (1936).
- ² A. Werner, Z. Anorg. Chem. 14, 23 (1897).
- W. C. Fernelius, em "Werner Centenial", Adv. Chem. Series, R. F. Gould Ed., V. 62, Cap. 11, p. 147 (1967).
- 4 "Definitive Rules for Nomenclature of Inorganic Chemistry", IUPAC, Butterworth & Co. Publ., Londres, 1959.
- 5 "Nomenclature of Inorganic Chemistry", IUPAC, Pure and Applied Chem. 28, 1 (1971).
- ⁶ R. Bicca de Alencastro, Química Nova 5, 67 (1982).
- ⁷ H. Rheinboldt, Rev. brasil. Chim. 2, 129 (1936).
- ⁸ P. G. da Fonseca, Rev. brasil. Chim. 1, 90 (1936).
- ⁹ A. Furia, Rev. brasil. Chim. 1, 13 (1936).
- W. G. Krauledat, "Notação e Nomenclatura de Química Inorgânica", Edit. Edgard Blucher Lt. — EDUSP, SP., 1960.
- A. Stock, Z. Angew. Chem. 32; 373 (1919); ibidem, 33 79 (1920); ibidem, Angew. Chem. 47, 568 (1934).
- ¹² R. V. G. Ewens e H. Bassett, *Chem. & Industry* 131 (1949).
- ¹³ "Nomenclature of Organic Chemistry", IUPAC, Butterworths, Londres, 53 (1971).

ARTIGO

O CARÁTER PSEUDO-HALOGÊNIO, PSEUDO-HALETO

Zacheu L. Santos

Departamento de Química da Universidade Federal do R.G. Norte.

Eduardo A. Neves

Instituto de Química da Universidade de São Paulo.

Recebido em 12/04/83

1. GENERALIDADES

Pseudo-haleto foi a expressão originalmente usada por BIRCKENBACH e KELLERMANN¹, na designação de agrupamentos atômicos tais como

OCN, SCN, SeCN, N3, CN

e seus isômeros estruturais, para denotar que algumas de suas propriedades físicas e químicas são similares às dos halogênios e haletos.

Posteriormente, BROWNE e colaboradores²⁻⁶ adotaram o termo halogenóide para denominar "qualquer agregado

químico", constituído de dois ou mais átomos eletronegativos, que manifestasse certas características dos halogênios e haletos, quando no estado molecular e iônico respectivamente.

Segundo WALDEN e AUDRIETH⁷, os haletos e pseudohaletos foram ordenados por BIRCKENBACH e KELLER-MANN, de acordo com a série eletromotriz abaixo

F⁻, ONC⁻, OCN⁻, Cl⁻, N₃, Br⁻, CN⁻, SCN⁻, CS₂N₃, I⁻, SeCN⁻, TeCN⁻,

tendo por base a condutividade elétrica de alguns de seus sais, em soluções aquosas e alcoólicas.