

Beknopte handleiding voor de nomenclatuur van de Anorganische Chemie*

R. M. Hartshorn (Nieuw-Zeeland), K.-H. Hellwich (Duitsland), A. Yerin (Rusland), T. Damhus (Denemarken), A. T. Hutton (Zuid-Afrika). *E-mail: inorganic.nomenclature@iupac.org, Financier: [IUPAC Division of Chemical Nomenclature and Structure Representation](http://www.chemicalnomenclature.org)
Nederlandse vertaling: Jan P. van Lune (KNCV), Jan Reedijk (KNCV), Leo Bergmans (KVCV), Ludo Brandt (KVCV), Jean van de Weerd (KVCV).

INLEIDING

Een universeel overeengekomen chemische nomenclatuur is een belangrijk instrument voor communicatie in de chemische wetenschappen, zowel voor het hanteren van zoektermen als voor regelgevende doeleinden. Te denken valt aan zaken die verband houden met gezondheid, veiligheid of handel. De [International Union of Pure and Applied Chemistry](http://www.chemicalnomenclature.org) (IUPAC) geeft aanbevelingen over de aard en het gebruik van chemische nomenclatuur.¹ De basis van deze nomenclatuur wordt in dit document beschreven. Verder wordt met hyperlinks verwezen naar de brondocumenten van verwante korte publicaties over organische verbindingen² en polymeren³. Een totaaloverzicht van chemische nomenclatuur staat beschreven in [Principles of Chemical Nomenclature](http://www.chemicalnomenclature.org)⁴, of voor een meer gedetailleerde versie in: [Nomenclature of Inorganic Chemistry](http://www.chemicalnomenclature.org) (ook wel bekend als het *Red Book*)⁵, en verwante uitvoerige publicaties over organische verbindingen (het *Blue Book*)⁶ en polymeren (het *Purple Book*)⁷. Opgemerkt dient te worden dat veel verbindingen niet-systematische of semi-systematische namen kunnen hebben (waarvan sommige niet door IUPAC toegestaan zijn, bijvoorbeeld omdat zij verwarrend of misleidend kunnen zijn). Soms kunnen IUPAC-regels ertoe leiden dat meer dan één systematische naam gegeven kan worden. IUPAC streeft ernaar dat uiteindelijk iedere verbinding slechts één naam heeft die gebruikt wordt in regelgeving (zogenoemde [Preferred IUPAC Names](http://www.chemicalnomenclature.org), ofwel PINs).

NB: In dit document wordt soms het symbool '=' gebruikt om namen, die te lang te zijn om op een tekstregel te passen, te splitsen, tenzij er al een koppeltteken in de naam aanwezig is.

De grenzen tussen 'organische' en 'anorganische' verbindingen zijn vervaagd. De nomenclatuursorten die in dit document beschreven worden, zijn toepasbaar op verbindingen, moleculen en ionen die geen koolstof bevatten, maar ook op vele structuren die wel koolstof bevatten (hoofdstuk 2), met name die met elementen uit groepen 1 tot 12 van het periodiek systeem. Voor boorbevattende verbindingen wordt een aparte, hier niet besproken, nomenclatuur gebruikt.⁸

1 STOICHIOMETRISCHE OF SAMENGESTELDE NAMEN

Een stoichiometrische of samengestelde naam geeft alleen informatie over de samenstelling van een ion, molecuul of verbinding, en kan worden gerefereerd aan zowel de empirische als aan de molecuulformule van die entiteit. Deze naam biedt géén informatie over de structuur.

Voor moleculen bestaand uit één atoomsoort (Tabel 1), waarbij slechts één element aanwezig is, wordt de naam gevormd door het combineren van de elementnaam met het juiste **numerieke voorvoegsel** (Tabel 2). Ionen worden benoemd door het toevoegen van de lading tussen haakjes, bijvoorbeeld (1+), (2+), (3+), en voor de (meeste) negatieve ionen wordt de benaming 'ide' gebruikt achter de Latijnse stam van het element. Voor zink en de elementen uit groep 18 van het periodiek systeem die eindigen op 'on', wordt de 'ide'-uitgang toegevoegd aan de elementnaam⁹. Voorbeelden zijn gegeven in tabel 1.

De naamgeving van **binaire verbindingen** (die atomen van twee verschillende elementen bevatten) is stoichiometrisch, door het combineren van elementnamen. Hierbij moet de volgende regel in acht genomen worden: het eerste element bij het volgen van de pijl in figuur 1, wordt behandeld als ware het een negatief ion. Zo krijgt de naam van dit 'elektro-negatieve' element het achtervoegsel 'ide' en wordt het geplaatst achter de naam van het 'elektro-positieve' element (Tabel 3).

* Vertaald uit: IUPAC, *Pure Appl. Chem.* **87**, 1039-1049 (2015). Copyright © IUPAC & De Gruyter 2015.

¹ Vrij beschikbaar via: (a) [Pure and Applied Chemistry](http://www.chemicalnomenclature.org); (b) <http://www.chemicalnomenclature.org>

² K.-H. Hellwich, R. M. Hartshorn, A. Yerin, T. Damhus, A. T. Hutton, Brief Guide to the Nomenclature of Organic Chemistry, *Pure Appl. Chem.*, in preparation.

³ R. C. Hiorns, R. J. Boucher, R. Duhlev, K.-H. Hellwich, P. Hodge, A. D. Jenkins, R. G. Jones, J. Kahovec, G. Moad, C. K. Ober, D. W. Smith, R. F. T. Stepto, J.-P. Vairon, J. Vohlidal, *Pure Appl. Chem.* **84**(10), 2167-2169 (2012).

⁴ *Principles of Chemical Nomenclature – A Guide to IUPAC Recommendations*, 2011 Edition, G. J. Leigh (Ed.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-1-84973-007-5.

⁵ *Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005*, N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton (Eds.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 0-85404-438-8.

⁶ *Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*, H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-182-4.

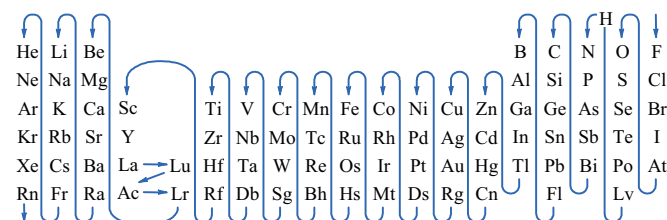
⁷ *Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature – IUPAC Recommendations 2008*, R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama, W. V. Metanowski (Eds.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-491-7.

Tabel 1: Voorbeelden van eenatomige entiteiten

Formule	Naam	Formule	Naam
O ₂	dizuurstof	Si ⁴⁻	silicide
S ₈	octazwavel	P ³⁻	fosfide
Na ⁺	natrium(1+)	S ²⁻	sulfide
Fe ³⁺	ijzer(3+)	Cl ⁻	chloride(1-) of chloride
H ⁻	hydride	As ³⁻	arsenide
D ⁻	deuteride	Se ²⁻	selenide
B ³⁻	boride	Sn ⁻	stannide
C ⁴⁻	carbide	Sb ³⁻	antimonide
N ³⁻	nitride	I ₃ ⁻	trijodide(1-)
N ₃ ⁻	trinitride(1-) of azide	Au ⁻	auride
O ²⁻	oxide	Pb ⁻	plumbide
O ₂ ²⁻	dioxide(2-) of peroxide	At ⁻	astatide
Na ⁻	natride		

Tabel 2: Numerieke voorvoegsels voor eenvoudige en complexe entiteiten

aantal	eenvoudig	complex	aantal	eenvoudig	complex
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis



Figuur 1: Elementvolgorde te gebruiken in naamgeving van binaire verbindingen

Tabel 3 Voorbeelden van namen van binaire verbindingen

Formule	Name	Formule	Name
GaAs	galliumarsenide	FeCl ₂	ijzerdichloride of ijzer(II)chloride
CO ₂	koolstofdioxide	FeCl ₃	ijzertrichloride of ijzer(III)chloride
CaF ₂	calciumdifluoride of calciumfluoride	H ₂ O ₂	diwaterstofdioxide of waterstofperoxide

In tabel 3 zijn de numerieke voorvoegsels uit tabel 2 aangebracht waar dit nodig is. Daarnaast worden algemeen aanvaarde alternatieven genoemd, die ook gebruikt mogen worden.¹⁰

Stoichiometrie kan in sommige gevallen impliciet aangegeven worden door het gebruik van oxidatiegetallen, maar wordt in veelvoorkomende gevallen ook gewoon weggelaten, zoals bij calciumfluoride.

De naamgeving van **heteropolyatomische entiteiten** verloopt normaliter op dezelfde manier, met behulp van op samenstelling gebaseerde nomenclatuur, maar vaak wordt ook vervangende nomenclatuur (substitutienomenclatuur),¹¹ of additieve nomenclatuur gebruikt (hoofdstuk 2). In het laatste geval wordt ook iets gezegd over hoe de atomen met elkaar verbonden zijn. POCl₃ (ook wel PCl₃O; samengestelde naam fosfortrichloride-oxide) bijvoorbeeld, krijgt een additieve naam (zie tabel 10).

Bepaalde ionen hebben algemeen aanvaarde korte namen die in het dagelijks gebruik voorkomen, zoals ammonium, NH₄⁺; hydroxide, OH⁻; nitriet, NO₂⁻; fosfaat, PO₄³⁻; difosfaat, P₂O₇⁴⁻.

Anorganische verbindingen zijn normaliter combinaties van positieve ionen, negatieve ionen en neutrale moleculen. Volgens afspraak wordt de naam van een verbinding opgebouwd uit de bestaande namen van de aanwezige entiteiten: positieve ionen worden als eerste genoemd, gevolgd door negatieve ionen en tenslotte neutrale componenten. Om de samenstelling van een verbinding weer te kunnen geven moet van elke component ook aangegeven worden hoe vaak hij voorkomt. Daarom worden numerieke voorvoegsels toegevoegd aan de naam van de entiteit (zie tabel 2). Bij eenvoudige entiteiten worden de voorvoegsels 'di', 'tri', 'tetra', etc. gebruikt. Bij entiteiten die van zichzelf al numerieke voorvoegsels of plaatsbepalingen bevatten, worden de voorvoegsels 'bis()', 'tris()', 'tetrakis()', etc. gebruikt.

⁸ Referentie 4, Hoofdstuk 10.

⁹ Referentie 5, Tabel IX.

¹⁰ Referentie 4, Tabel P10.

¹¹ Referentie 5, Hoofdstuk IR-6.



In gevallen waar het gebruik van een eenvoudig numeriek voorvoegsel tot een misinterpretatie kan leiden, moet de naamgeving hierop aangepast worden. Zo moet tris(jodide) gebruikt worden voor 3I^- en niet trijodide (wat gebruikt wordt voor I_3^-). Ook moet bis(fosfaat) gebruikt worden als er twee fosfaationen aanwezig zijn en niet difosfaat, want dat wordt gebruikt voor $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$. Voorbeelden van de hierboven beschreven naamgeving zijn weergegeven in tabel 4.

Tabel 4: Gebruik van numerieke voorvoegsels in samengestelde namen

Formule	Naam
$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	tricalciumbis(fosfaat)
$\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$	dicalciumdifosfaat
BaO_2	barium(2+)dioxide(2-) of bariumperoxide
$\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	magnesiumsulfaatheptahydraat
$\text{CdSO}_4 \cdot 6\text{NH}_3$	cadmiumsulfaat-ammoniak (1/6)
$\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$	aluminiumkaliumbis(sulfaat)-water (1/12) of aluminiumkaliumbis(sulfaat)dodecahydraat
$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot \text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 24\text{H}_2\text{O}$	dialuminiumtris(sulfaat)-dikaliumsulfaat-water (1/1/24)

Er worden geen klinkers weggelaten in de namen (bijvoorbeeld pentaoxide). De enige uitzondering mag gemaakt worden voor mon(o)oxide. Als er twee gelijke klinkers achter elkaar geplaatst worden die bij een verschillend naamonderdeel horen, dan komt er een koppelteken tussen de klinkers (bijvoorbeeld mono-oxide, tetra-acetaat). Ook mag ter verduidelijking een koppelteken geplaatst worden (bijvoorbeeld penta-oxide). Namen van neutrale componenten (moleculen) worden gescheiden door een kastlijntje (lang, liggend streepje) zonder spaties. Anorganische verbindingen kunnen zelf ook componenten zijn in (formele) additieverbindingen (zie de laatste vier voorbeelden in tabel 4). De stoichiometrische verhouding van de componenten binnen deze verbindingen wordt in het algemeen tussen haakjes na de naam van de verbinding gegeven (zie de laatste drie voorbeelden in tabel 4). In het bijzondere geval van hydraten kan een numeriek voorvoegsel worden gebruikt samen met de term 'hydraat'.

2 COMPLEXEN EN ADDITIEVE NOMENCLATUUR

2.1 Algemene aanpak

Additieve nomenclatuur is ontwikkeld om structuren van coördinatieverbindingen (coördinatie-eenheden of complexen) te beschrijven, maar is inmiddels uitgebreid naar andere moleculaire entiteiten. Mononucleaire coördinatieverbindingen bestaan uit een centraal atoom, vaak een metaalion, dat is gebonden aan omringende kleine moleculen of ionen; zogenaamde liganden. De naam van een complex wordt samengesteld uit de namen van de liganden gevolgd door die van het centrale atoom, gebruikmakend van numerieke voorvoegsels (zie tabel 5). Formules worden hieruit gevormd door de symbolen of afkortingen van de liganden juist ná de symbolen van de centrale atomen weer te geven (zie §2.7).

Tabel 5: Naamgeving van complexen: eenvoudige liganden

Structuur		
Centrale atoom	kobalt(III)	$2 \times$ rhenium
Bepalen en benoemen van de liganden	ammoniak → ammine water → aqua	chloride → chlorido
Samengestelde naam	Penta-ammineaqua=kobalt(III)chloride	cesiumbis(tetrachlorido=rhenaat) (Re—Re)(2-)

2.2 Centrale atomen en liganden

De eerste stap in de naamgeving is het bepalen van het centrale atoom / de centrale atomen en daaruit volgend ook de liganden. Volgens afspraak worden de elektronen die betrokken zijn bij de binding tussen het centrale atoom en een ligand beschouwd als behorend tot het ligand (en dit bepaalt hoe de verbinding wordt genoemd). Elk ligand wordt met de juiste nomenclatuur als een aparte entiteit benoemd – meestal substitutieve nomenclatuur voor organische liganden en additieve nomenclatuur voor anorganische liganden. Een klein aantal veelvoorkomende moleculen en ionen krijgt een **specifieke naam** wanneer ze aanwezig zijn in complexen. Zo wordt een waterligand in de volledige naam weergegeven met de term 'aqua'. Een ammoniakligand wordt weergegeven met 'ammine', koolstofmono-oxide dat met het koolstofatoom gebonden is aan het centrale atoom met 'carbonyl' en stikstofmono-oxide dat via het stikstofatoom gebonden is met 'nitrosyl'. Namen van **anionische liganden** die eindigen op 'ide', 'aat', of 'iet' worden gewijzigd, zodat de volledige naam van het complex respectievelijk eindigt op 'ido', 'ato' of 'ito'. Het 'ido' einde wordt tegenwoordig ook gebruikt voor halogeen- en oxidideliganden. Eén gecoördineerd waterstofatoom wordt altijd als anionisch beschouwd en wordt in de naam weergegeven met 'hydrido'. Een gecoördineerd diwaterstof wordt meestal als een neutrale donor van twee elektronen beschouwd.

2.3 Opstellen van samengestelde namen

Zodra de liganden zijn benoemd, kan de naam samengesteld worden. Dit geschiedt door de namen van de liganden in alfabetische volgorde vóór de naam van het centrale atoom / de centrale atomen te plaatsen, ongeacht de lading van de liganden. Wanneer er meer dan één ligand van een bepaald soort op dezelfde wijze is gebonden aan een centraal atoom, wordt voor eenvoudige of complexe liganden het aantal van deze identieke liganden aangegeven met het juiste numerieke voorvoegsel (zie tabel 2). De reeds bestaande alfabetische volgorde van de liganden wordt hierbij niet veranderd. Bij uit meerdere onderdelen bestaande verbindingen, waarvan de naam met haakjes omgeven moet worden, worden de volgende typen haken gebruikt, in de hierna gegeven volgorde van hiërarchie: (), [()], { () }, etc.

Metaal-metaalbindingen worden aangegeven door na de naam van het complex het symbool van het centrale atoom cursief tussen haakjes te zetten en zonder spaties met een kastlijntje te verbinden met de naam van het complex. Daarna wordt de **lading** van het complex of het **oxidatiegetal** van het centrale atoom toegevoegd aan de naam van het complex. Voor **anionen** waarvan de naamgeving additief is, krijgt het centrale atoom de uitgang 'aat', op dezelfde wijze als de 'ide' uitgangen van anionen die uit één atoomsoort bestaan (zie hoofdstuk 1). In sommige gevallen wordt de Latijnse naam vóór de 'aat' uitgang geplaatst, zoals bij ferraat (ijzer), cupraat (koper), argentaat (zilver), stannaat (tin), aurat (goud), mercuraat (kwik) en plumbaat (lood). Tenslotte worden de regels zoals beschreven in hoofdstuk 1 gebruikt om de namen van de ionische of neutrale coördinatie-entiteiten te combineren met de namen van alle andere 'entiteiten' die deel uitmaken van de verbinding.

2.4 Het specificeren van de binding

Enkele liganden kunnen met verschillende atomen aan een centraal atoom binden. Dit is afhankelijk van de chemische omstandigheden. Om aan te geven welke van de coördinerende atomen gebonden zijn in een complex, kunnen **κ-termen** aan de naam van het ligand worden toegevoegd. De κ-term bestaat uit de Griekse letter κ, gevolgd door een cursief gedrukt symbool van het coördinerende atoom. Bij meer complexe liganden wordt de κ-term vaak geplaatst achter naam van het ligand waar de κ-term betrekking op heeft. Meerdere gelijkwaardige bindingen aan een centraal atoom worden aangeduid door in superschrift het aantal van deze bindingen toe te voegen tussen κ en de elementsymbolen (zie tabel 6). Deze mogelijkheden worden in meer detail besproken in het 'Red Book'.⁵ Wanneer de ligerende atomen van een ligand aaneengesloten zijn (d.w.z. direct aan elkaar gebonden), wordt een **η-term** gebruikt in plaats van een κ-term. Dit is bijvoorbeeld het geval in een groot aantal organometaalverbindingen (zie § 2.6) en de peroxidocomplexen (zie tabel 6).

Een κ-term is noodzakelijk bij liganden waar meer dan één coördinerende vorm van mogelijk is. Een aantal specifieke gevallen:

➤ thiocynaat, dat zowel via het zwavelatoom (thiocynaat-κS) als via het stikstofatoom (thiocynaat-κN) gebonden kan zijn

Tabel 6: Het samenstellen van namen voor complexen: complexe liganden

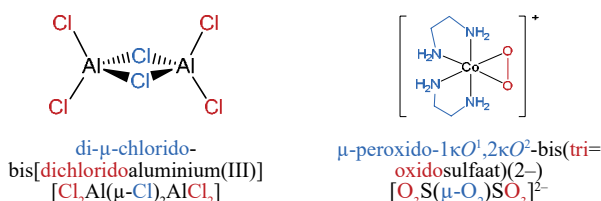
Structuur		
Centrale atoom	kobalt(III) → kobaltaat(III)	platina(II)
Bepalen en benoemen van de liganden	2,2',2'',2'''-(ethaan-1,2-diyl=dinitrilo)tetra-acetaat → 2,2',2'',2'''-(ethaan-1,2-diyl=dinitrilo)tetra-acetato	chloride → chlorido trifenyfosfaan
Bepalen van de ligerende atomen	2,2',2'',2'''-(ethaan-1,2-diyl=dinitrilo-κ²N)tetra-acetato-κ⁴O	niet vereist voor chloride triphenylphosphane-κP
Samengestelde naam	barium [2,2',2'',2'''-(ethaan-1,2-diyl=dinitrilo-κ²N)tetra-acetato-κ⁴O]kobaltaat(III)	dichloridobis(trifenylofosfaan-κP)platina(II)
Structuur		
Centrale atoom	kobalt(III)	molybdeen(III)
Bepalen en benoemen van de liganden	ethaan-1,2-diamine peroxide → peroxido	chloride → chlorido 1,4,8,12-tetrathiacyclopentadecaan
Bepalen van de ligerende atomen	ethaan-1,2-diamine-κ²N η²-peroxido	Niet vereist voor chloride 1,4,8,12-tetrathiacyclopentadecaan-κ³S¹, S⁴, S⁵, S⁸
Samengestelde naam	bis(ethaan-1,2-diamine-κ²N)=(η²-peroxido)kobalt(III)	trichlorido(1,4,8,12-tetrathiacyclopentadecaan-κ³S¹, S⁴, S⁵, S⁸)molybdeen(III)

- nitriet, dat zowel via het stikstofatoom ($M\text{-NO}_2$, nitrito- κN), als een zuurstofatoom ($M\text{-ONO}$, nitrito- κO) gebonden kan zijn.
- De namen penta-ammine(nitrito- κN)kobalt(2+) en penta-ammine-(nitrito- κO)kobalt(2+) worden gebruikt voor alle isomere kationische nitritocomplexen.

Meer voorbeelden waarin κ -termen worden gebruikt om de binding met de liganden aan te geven, zijn weergegeven in tabel 6. Een κ -term kan ook gebruikt worden om aan te geven aan welk van de centrale atomen een ligand gebonden is als er meer dan één centraal atoom aanwezig is (zie §2.5).

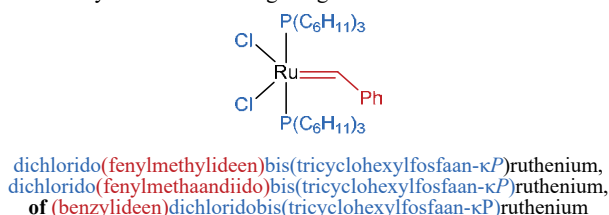
2.5 Brugliganden

Brugliganden zijn liganden die aan meer dan één centraal atoom gebonden zijn. In de naamgeving worden ze uit elkaar gehouden door toevoeging van het voorvoegsel 'μ' (de Griekse mu). Verder worden het gebruikte voorvoegsel en de naam van het verbindende ligand gescheiden van elkaar en van de rest van de naam door een koppelteken. Op deze manier kan de naam van een complex met verbindende liganden gegeven worden als er sprake is van een éénatomig ligand. Bij ingewikkelder liganden kan het echter noodzakelijk zijn om te specificeren welk ligerend (coördinerend) atoom van het ligand aan welk centraal atoom is gebonden. Dit is in ieder geval noodzakelijk als er verschillende soorten ligerende atomen aanwezig zijn en er κ -termen worden gebruikt.



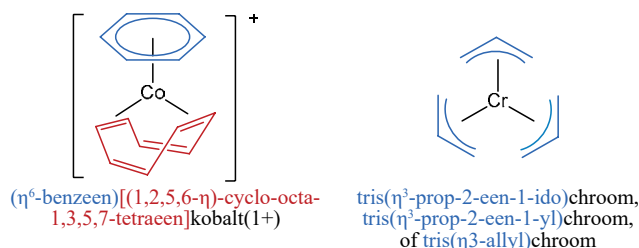
2.6 Organometaalverbindingen

Organometaalverbindingen bevatten ten minste één binding tussen een metaalatoom en een koolstofatoom. Deze coördinatieverbindingen of metaalcomplexen worden op dezelfde wijze benoemd als in de hierboven beschreven additieve naamgeving. De naam van een organisch ligand dat met één koolstofatoom gebonden is, wordt verkregen door het ligand óf wel als een anion te beschouwen, óf wel als een neutrale substituent. Aan de verbinding $[\text{Ti}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl})_3]$ kan daardoor zowel de naam trichlorido(propaan-1-ido)titaan als trichlorido(propyl)titaan gegeven worden. Op dezelfde wijze kan 'methanido' of 'methyl' worden gebruikt voor het ligand $-\text{CH}_3$. Wanneer een organisch ligand twee of drie enkelvoudige metaal-koolstofbindingen vormt (met één of meer metaalcentra), kan het ligand worden beschouwd als een di- of tri-anion met de uitgangen 'diido' of 'triido'. Bij dit type liganden is echter ook het gebruik van de achtervoegsels 'diyl' en 'triyl' nog steeds veelvoorkomend. Voor een bidentaat ligand dat met twee atomen gebonden is, zoals $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$, wordt dan de naam propaan-1,3-diido (of propaan-1,3-diyl) gegeven bij gelering aan één metaalcentrum (dus met twee bindingen gebonden aan hetzelfde metaalcentrum) en μ-propaan-1,3-diido (of μ-propaan-1,3-diyl) bij het verbinden van twee metaalatomen. Bij organometaalverbindingen die een meervoudige metaal-koolstofbinding hebben, krijgen de koolwaterstoffen een 'voorvoegselnaam'. Deze is afgeleid van de naam van de oorspronkelijke koolwaterstof met als achtervoegsel 'ylideen' bij een dubbele metaal-koolstofbinding en met 'ylidyn' bij een drievoudige metaal-koolstofbinding. Indien geen plaatsaanduiding noodzakelijk is, wordt dit achtervoegsel direct achter de 'stamnaam' van de koolwaterstof geplaatst en indien er wel een plaatsaanduiding noodzakelijk is, wordt achter de naam van de oorspronkelijke koolwaterstof de plaatsaanduiding geplaatst (met koppeltokens ertussen) waarna tenslotte het achtervoegsel volgt. Het fragment $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{}$ wordt dus (als het een ligand is) propylideen genoemd, en $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{}$ heet propaan-2-ylideen. De 'diido'-'/ 'triido'-benadering zoals hierboven beschreven kan in dit geval ook gebruikt worden. De termen 'carbeen' en 'carbyn' worden niet gebruikt in de systematische naamgeving.



De bijzondere aard van de binding van onverzadigde koolwaterstoffen aan metalen op een zijwaartse manier via hun π -elektronen vereist gebruik van de **ëta-methode** (η).

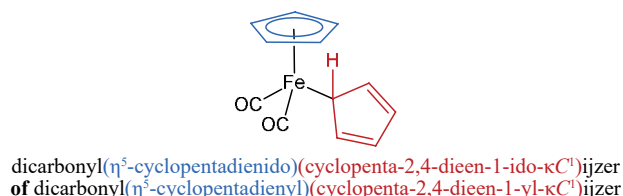
In deze zogenaamde 'hapto'-naamgeving wordt het aantal opeenvolgende koolstofatomen in het ligand gecoördineerd aan het metaal (de hapticeit van het ligand) aangegeven door een superscript rechts van het ëta-symbool, bijvoorbeeld η^3 ('ëta-drie' of 'trihapto'). De η -term wordt toege-



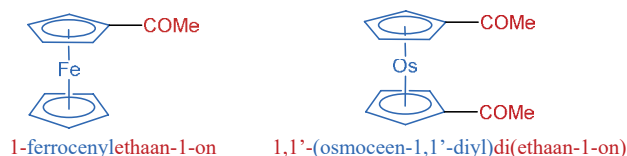
voegd als voorvoegsel aan de naam van het ligand, of, indien nodig, aan dát deel van de ligandnaam dat het meest geschikt is om de plaats van de binding weer te geven.

Een overzicht van een groot aantal via π -elektronen gebonden neutrale en anionische **onverzadigde liganden** kan gevonden worden in het 'Red Book'.⁵

Hierbij dient opgemerkt te worden dat de naam van het veelvoorkomende ligand $\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5$ officieel η^5 -cyclopenta-2,4-dieen-1-ido is, maar dat ook de namen η^5 -cyclopentadienido of η^5 -cyclopentadienyl toegelaten zijn. Wanneer cyclopenta-2,4-dieen-1-ido coördineert via één koolstofatoom middels een σ -binding wordt een κ -term toegevoegd om die binding expliciet aan te duiden. Het symbool η^1 mag hier niet worden gebruikt, omdat de 'ëta-aanpak' alleen geldt voor de binding van (twee of meer) aangrenzende atomen in een ligand.



Geïsoleerde moleculen die twee parallelle η^5 -cyclopentadienido liganden in een 'sandwich'-structuur rond een overgangsmetaal bevatten, zoals in bis(η^5 -cyclopentadienido)ijzer, $[\text{Fe}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)_2]$, worden metallocenen genoemd en krijgen 'ocean' in hun namen. Een voorbeeld hiervan is ferrocen. Dit 'ocean' mag op dezelfde manier worden gebruikt als de oorspronkelijke koolwaterstofnamen in de substitutieve naamgeving hierboven. Hierbij krijgen de substituenten namen met 'oceny' ('oceendiyl', 'oceentriyl' (onder toevoeging van de juiste plaatsnummers).



Volgens afspraak wordt bij de naamgeving van de **belangrijkste elementen** in 'organo-elementverbindingen' de vervangende nomenclatuur gebruikt als de elementen afkomstig zijn uit de groepen 13-16, maar wordt gebruik gemaakt van additieve naamgeving als ze afkomstig zijn uit de groepen 1 en 2. In sommige gevallen, als er minder gegevens over de exacte structuur weergegeven hoeven te worden, wordt de samengestelde naamgeving gebruikt. Meer details zijn te vinden in het 'Red Book'.⁵

2.7 Formules van coördinatieverbindingen

Bij coördinatie-entiteiten wordt de formule die de samenstelling van deze 'entiteit' weergeeft, tussen vierkante haken weergegeven. In tabel 7 is weergegeven hoe het proces om tot deze notatie te komen, werkt. Het symbool van het centrale atoom wordt vooraan gezet en daarna volgen in alfabetische volgorde de symbolen of afkortingen van de liganden. Indien mogelijk wordt het coördinerende (ligerende) atoom dichterbij het centrale atoom geplaatst om zodoende meer informatie over de structuur van het complex te bieden. Indien mogelijk moeten, om dezelfde reden, de verbindende liganden geplaatst worden tussen de symbolen van de centrale atomen (zie voorbeelden in §2.5). Algemeen geldt dat formules en afkortingen van liganden tussen haakjes geplaatst worden (behalve als het ligand slechts één atoom bevat). Hierbij dient wel in acht te worden genomen dat vierkante haken zijn voorbehouden om de coördinatie weer te geven. Indien meerdere liganden aanwezig zijn, worden deze aangeduid met behulp van een subscript na de haakjes of na het symbool van het ligand.

2.8 Anorganische oxozuren en verwante verbindingen

Anorganische oxozuren en de anionen die gevormd worden door afsplitsing van een H^+ -ion hebben veelal traditionele namen, die gevonden kunnen worden in vele handboeken: zwavelzuur, sulfaat; salpeterzuur, nitraat; salpeterigzuur, nitriet; fosforzuur, fosfaat; arseenzuur, arseenaat; arsenigzuur, arseniet; kiezelzuur, silicaat; etc. Deze namen blijven gehandhaafd in de IUPAC-nomenclatuur, ten eerste omdat dit de in praktijk gehanteerde namen zijn en ten tweede omdat ze een bijzondere rol spelen in de

Tabel 7: Het maken van formules van complexen

Structuur		
Centraal atoom/atomen	Co	2 × Re
Liganden	NH ₃ , OH ₂	Cl
Samengestelde formule	[Co(NH ₃) ₃ (OH ₂)]Cl ₃	Cs ₂ [Cl ₄ ReReCl ₄]
Structuur		
Centraal atoom/atomen	Co	Pt
Afkorten van liganden	2,2',2'',2'''-(ethaan-1,2-diyl)dinitrilotetra-acetaat → edta	Cl trifenyfosfaan → PPh ₃
Samengestelde formule	Ba[Co(edta)] ₂	[PtCl ₂ (PPh ₃) ₂]

organische naamgeving als er namen nodig zijn voor organische derivaten van deze zuren. Alle oxozuren en hun derivaten kunnen echter ook gezien worden als coördinatie-entiteiten, waarvoor de systematische naamgeving volgens de additieve naamgeving geldt (zie tabel 8).

Tabel 8: Voorbeelden van anorganische oxozuren en derivaten

Formule	Traditionele of organische naam	Additieve naam
H ₂ SO ₄ of [S(O) ₂ (OH) ₂]	zwavelzuur	dihydroxidodioxidozwavel
(CH ₃) ₂ SO ₃ of [S(O) ₂ (OMe) ₂]	dimethylsulfaat	dimethoxidodioxidozwavel of dimethanolatodioxidozwavel
H ₃ PO ₃ of [P(H)(O)(OH) ₂]	fosforigzuur*	hydridodihydroxido-oxidofosfor
PhP(O)(OH) ₂	fenylfosforigzuur	dihydroxido-oxido(fenyl)fosfor

* Opmerking: De term 'fosforigzuur' wordt in de literatuur gebruikt voor zowel fosforigzuur als voor P(OH)₃ (trihydroxidofosfor). In de organische naamgeving wordt fosforigzuur alleen voor P(OH)₃ gebruikt.

De traditionele namen van oxozuren kunnen worden gewijzigd volgens de vastgestelde regels voor het benoemen van derivaten gevormd door **functionele vervanging**: dus 'thio' geeft de vervanging van =O door =S weer; de voorvoegsels 'fluor', 'chlor', etc., en de tussenvoegsels 'fluoride', 'chloride', etc., duiden op een vervanging van –OH door –F, –Cl, etc.; 'peroxy'/'peroxo' duidt op de vervanging van –O– door –OO–; enzovoort (zie tabel 9).

Als alle hydroxygroepen in een oxozuur worden vervangen, is de verbinding niet langer een zuur en wordt ze niet meer als zodanig benoemd, maar krijgt deze de naam van een **functionele groep**, zoals bijvoorbeeld een zuurhalogenide of een amide. De naamgeving van dergelijke verbindingen kan weer systematisch worden met behulp van additieve naamgeving (zie tabel 10).

Een speciale constructie wordt gebruikt bij **waterstofnamen**. Hierdoor wordt het mogelijk om weer te geven dat waterstofionen gebonden zijn aan een anion, zonder specifiek aan te geven waar. In dergelijke namen wordt het woord 'waterstof' geplaatst aan het begin van de naam met een numeriek voorvoegsel (indien van toepassing) en vervolgd wordt (zonder spatie) met de rest van de naam tussen haakjes. Bijvoorbeeld diwaterstof(difosfaat)(2–) is H₂P₂O₇^{2–}, een difosfaat ion waaraan twee waterstofionen zijn toegevoegd, waarvan de exacte positie niet wordt weergegeven.

Men kan de gangbare namen van oxozuren waarvan een deel van de waterstofionen afgesplitst is, zoals waterstoffsulfaat, HPO₄^{2–} en diwaterstoffsulfaat,

Tabel 9: Voorbeelden van derivaten van anorganische oxozuren en anionen gevormd door functionele verplaatsing

Formule	Naam die de functionele vervanging weergeeft	Additieve naam
H ₂ PS ₂ of [P(S)(SH) ₂]	tetrathiofosforzuur of fosfortetrathiozuur	tris(sulfanido)sulfido= fosfor
H ₂ PFO ₃ of [PF(O)(OH) ₂]	fluorfosforzuur of fosforfluoridezuur	Fluoridodihydroxido= oxidofosfor
S ₂ O ₄ ^{2–} of [S(O ₂)(S)] ^{2–}	thiosulfaat of zwavelthioaat	trioxidosulfido= sulfaat(2–)
[O ₃ S(μ-O ₂)SO ₃] ^{2–}	peroxydisulfaat	Zie §2.5

Tabel 10: Voorbeelden van namen van functionele klassen en de bijbehorende additieve namen

Formule	Naam van de functionele klasse	Additieve naam
PCl ₃ O	fosforylchloride	trichlorido-oxidofosfor
SCl ₂ O ₂	sulfonyldichloride	dichloridodioxidozwavel
S(NH ₂) ₂ O ₂	sulfonyldiamide	diamidodioxidozwavel

H₂PO₄[–], beschouwen als speciale gevallen van dergelijke waterstofnamen. In deze vereenvoudigde namen wordt de lading en de haakjes rond de naam van het belangrijkste onderdeel weggelaten.

Ook hier kunnen de namen van specifieke anionen systematisch bepaald worden met behulp van de additieve naamgeving.

3 STEREOCHEMISCHE AANDUIDINGEN

De geometrie rond het centrale atoom kan worden beschreven met een zogenaamd **polyedrisch symbool** dat aan het begin van de naam wordt geplaatst. Dit symbool bestaat uit schuingedrukte letters die de geometrie aangeven en een getal dat het coördinatiegetal aangeeft. Veelgebruikte polyedrische symbolen zijn OC-6 (octaëdrisch), SP-4 (vlak vierkant), T-4 (tetraëdrisch), SPY-5 (vierkant-pyramidaal), en TBPY-5 (trigonaal-bipyramidaal). Uitgebreidere overzichten zijn beschikbaar.¹²

De onderlinge posities van coördinerende groepen rond een centraal atoom kunnen worden beschreven met behulp van een **configuratief-index** die voor elke geometrie op een eigen wijze bepaald is,¹³ en die gebaseerd is op de Cahn-Ingold-Prelog-prioriteiten van de coördinerende groepen.¹⁴ Deze index kan veranderen wanneer de liganden veranderen, zelfs als de geometrie gelijk blijft.

De absolute configuratie van een coördinatie-eenheid kan ook worden beschreven. In het algemeen worden configuratie-indexen alleen gebruikt wanneer er meer dan één mogelijkheid bestaat en één bepaald stereo-isomeer wordt bedoeld. De volledige stereochemische beschrijvingen voor de twee vlakvierkante platina-verbindingen (zie hieronder), zijn respectievelijk (SP-4-2) en (SP-4-1), voor de *cis*- en *trans*-isomeren. Desgewenst kan er ook een uitgebreide reeks van traditionele stereochemische beschrijvingen worden gebruikt, afhankelijk van de situatie. De isomeren die mogelijk zijn wanneer een vlak-vierkant complex gecoördineerd is door twee liganden van één type, en door twee van een ander type, worden aangeduid als *cis*- (wanneer de identieke liganden naast elkaar gecoördineerd zijn), of als *trans*- (wanneer ze tegenover elkaar gecoördineerd zijn).



cis-diamminedichloridoplatina(II) *trans*-diamminedichloridoplatina(II)

Octaëdrische centra met vier liganden van één soort en twee van een andere kunnen ook worden aangeduid als *cis*- (wanneer de twee identieke liganden naast elkaar zijn gecoördineerd) of *trans*- (wanneer ze tegenover elkaar zijn gecoördineerd). Octaëdrische centra met twee groepen van drie liganden kunnen worden beschreven als *fac*- (faciaal), wanneer de drie gelijke liganden gelocaliseerd zijn op één vlak van een octaëder – dus onderling alle drie *cis* – of als *mer*- (meridionaal), wanneer deze drie liganden niet in één octaëdervlak liggen.

4 SAMENVATTING

Deze publicatie geeft een beknopt overzicht van de essentiële nomenclatuurregels voor het opstellen van namen en formules voor anorganische verbindingen, coördinatieverbindingen en organometaal-verbindingen. Daarnaast is ook een analogo document voor de naamgeving van organische verbindingen beschikbaar.²

Namen en formules zijn van belang voor het beschrijven van structuren, bijvoorbeeld in wetenschappelijke publicaties en studieboeken. Het is echter essentieel dat de lezer in staat is om een naam of een formule correct te interpreteren, bijvoorbeeld door deze te kunnen vertalen naar een structuurdiagram. Dit document is dan ook bedoeld als hulpmiddel bij de interpretatie van namen en formules.

Tenslotte wordt nog opgemerkt dat IUPAC aanbevelingen heeft gepubliceerd over de grafische voorstelling van chemische structuren, inclusief stereochemische configuraties.¹⁵

¹² Referentie 4, Tabel P5; Referentie 5, Tabbellen IR-9.2 en IR-9.3.

¹³ Referentie 5, Sectie IR-9.3.3.

¹⁴ R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 5, 385–415 and 511 (1966); V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, 21, 567–583 (1982).

¹⁵ J. Brecher, K. N. Degtyarenko, H. Gottlieb, R. M. Hartshorn, G. P. Moss, P. Murray-Rust, J. Nyitrai, W. Powell, A. Smith, S. Stein, K. Taylor, W. Town, A. Williams, A. Yerin, *Pure Appl. Chem.*, 78(10), 1897–1970 (2006); J. Brecher, K. N. Degtyarenko, H. Gottlieb, R. M. Hartshorn, K.-H. Hellwich, J. Kahovec, G. P. Moss, A. McNaught, J. Nyitrai, W. Powell, A. Smith, K. Taylor, W. Town, A. Williams, A. Yerin, *Pure Appl. Chem.*, 80(2), 277–410 (2008).