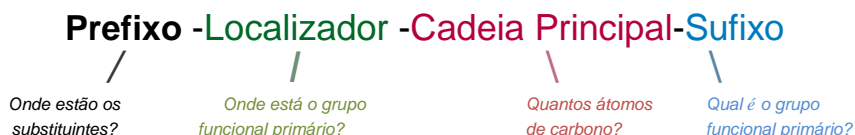
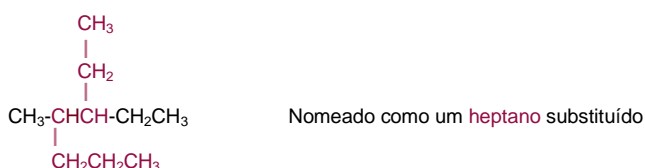
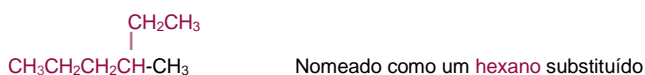




Nomenclatura de Compostos Orgânicos

O sistema de nomenclatura que usaremos no Curso foi desenvolvido pela *Internacional Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC - União Internacional de Química Pura e Aplicada). O nome de um composto orgânico tem quatro partes de acordo com o sistema de nomenclatura IUPAC: prefixo, localizador, cadeia principal e sufixo. O prefixo especifica a localização e a identidade dos vários grupos substituintes na molécula; o localizador dá a localização do grupo funcional primário; a cadeia principal seleciona a parte essencial da molécula e nos diz quantos átomos de carbono fazem parte dessa cadeia; e finalmente, o sufixo identifica o grupo funcional primário.

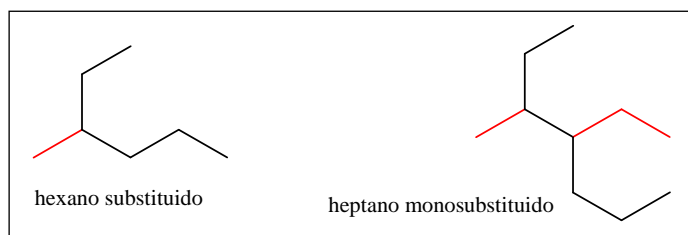


À medida que abordarmos novos grupos funcionais no curso será introduzido as regras de nomenclatura IUPAC. Além disso, na parte II deste resumo da nomenclatura de compostos orgânicos também abordamos as regras de nomenclatura para compostos orgânicos com mais de um grupo funcional. No momento, veremos como nomear alcanos de cadeia ramificada e aprenderemos algumas regras gerais de nomenclatura que se aplicam a todos os compostos.

A maioria dos alcanos de cadeia ramificada é nomeada seguindo as quatro etapas descritas a seguir. Para alguns poucos compostos é necessária uma quinta etapa.

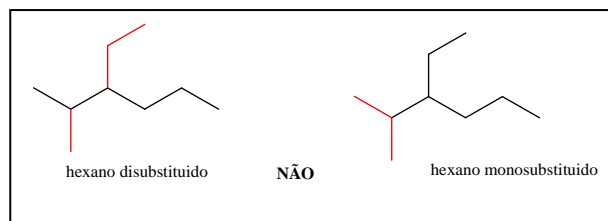
ETAPA Nº 1 - Identifique a cadeia principal

(a) Identifique a cadeia de átomos de carbono mais longa e contínua e use o nome dessa cadeia como o nome da cadeia principal. A cadeia mais longa nem sempre está aparente na representação utilizada para descrever a molécula.



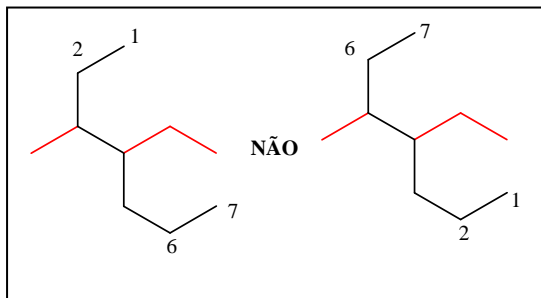


- (b) Se duas cadeias diferentes de mesmo comprimento estiverem presentes, escolha aquela com um número maior de ramificações como a principal:



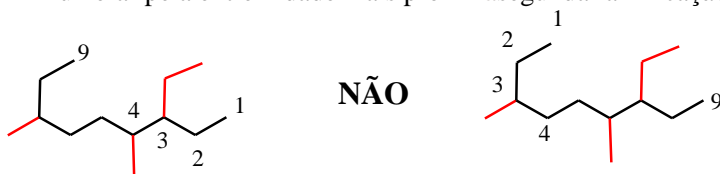
ETAPA Nº 2 - Numere os átomos da cadeia principal

- (a) Iniciando pela extremidade mais próxima da primeira ramificação, enumere cada átomo de carbono na cadeia principal:



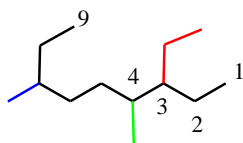
A primeira ramificação ocorre no C3 no sistema correto de numeração e não no C4.

- (b) Se existirem ramificações situadas à mesma distância das extremidades da cadeia principal, comece a numerar pela extremidade mais próxima da segunda ramificação:



ETAPANº3. Identifique e numere os substituintes

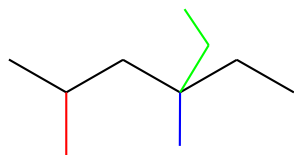
- (a) Atribua um número, chamado de *localizador*, a cada grupo substituído para localizar seu ponto de ligação com a cadeia principal:



Nomeado como um nonano
Substituintes: No C3, CH_2CH_3 (3-etila)
No C4, CH_3 (4-metila)
No C7, CH_3 (7-metila)



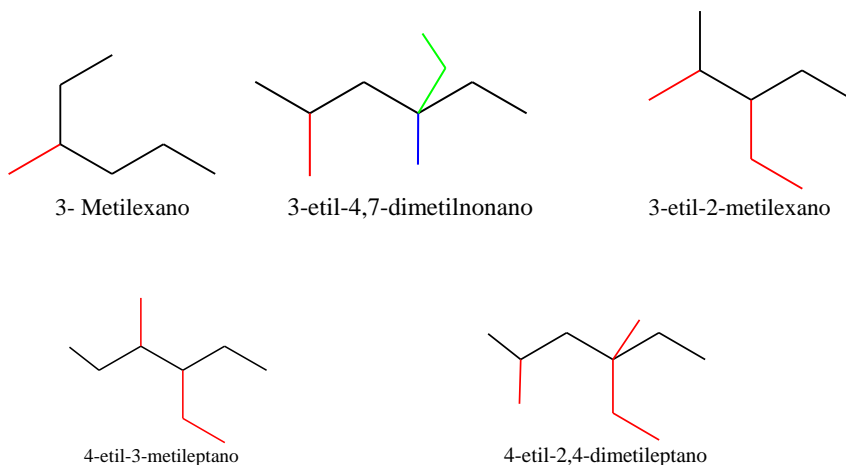
(b) Se existem dois substituintes no mesmo carbono, dê a ambos o mesmo número. Devem existir tantos números no nome quanto à quantidade de substituintes.



Nomeado como um hexano
Substituintes: No C2, CH₃ (2-metila)
No C4, CH₃ (4-metila)
No C4, CH₂CH₃ (4-etila)

ETAPA Nº 4. Escreva o nome do composto com uma única palavra

Use os hífens para separar os diferentes prefixos e utilize vírgulas para números. Se dois ou mais substituintes diferentes estiverem presentes no mesmo Carbono coloque-os em ordem alfabética. Se forem iguais, use um dos prefixos múltiplos *di-*, *tri-*, *tetra-* e assim por diante, mas não use estes prefixos para colocar na ordem alfabética. Os nomes completos para alguns dos exemplos encontrados ao longo do curso são apresentados a seguir:



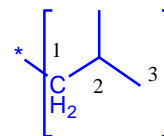
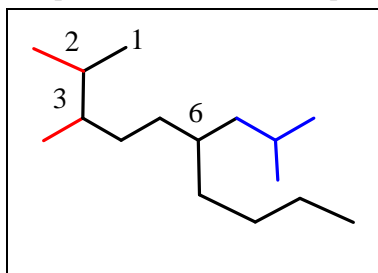
ETAPA Nº 5 Nomeie um substituinte complexo como se ele mesmo fosse um composto.

Em alguns casos mais complexos, há a necessidade de uma quinta etapa. Isso ocasionalmente acontece quando um substituinte da cadeia principal é um substituinte com cadeia ramificada. No exemplo a seguir, o substituinte no C6 é uma cadeia com três átomos de carbono com um grupo metila como ramificação.

Para nomear o composto por completo, o substituinte complexo deve ser nomeado primeiro.

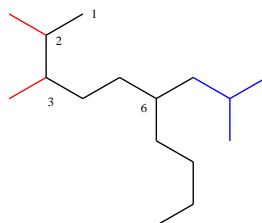
Nomeado como um decano

2,3,6-trissubstituído
Um grupo 2-metilpropila



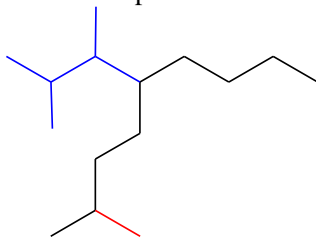
Comece numerando o substituinte ramificado no seu ponto de ligação como cadeia principal e identifique-o como um grupo 2-metilpropila.

O substituinte é colocado em ordem alfabética de acordo com a primeira letra do seu nome completo (incluindo qualquer prefixo numérico) e fica entre parênteses ao nomear a molécula inteira.

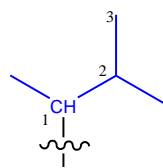


2,3-Dimetil- 6-(2-metilpropila)decano

Outro exemplo:



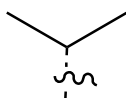
5-(1,2-Dimetilpropila)-2-metilnonano



Um grupo 1,2-dimetilpropila

Por razões históricas, alguns dos grupos alquila de cadeia ramificada mais simples possuem nomes comuns, não sistemáticos, como já visto anteriormente:

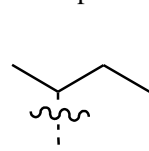
1. Um grupo alquila de três átomos de carbono:



Isopropila (*i*-Pr)



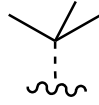
2. Grupos alquila de quatro átomos de carbono:



sec-Butila
(**sec-Bu**)

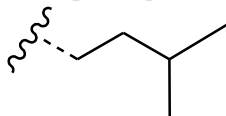


Isobutila



tert-Butila
(**t-butila** ou **t-Bu**)

3. Grupos alquila de cinco átomos de carbono:



Isopentila, também chamada isoamil (i-amila)

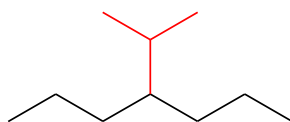
.....

Neopentila

.....

tert-Pentila, também denominada tert-amila (t-amila)

Os nomes desses grupos alquila simples são tão usados na literatura química que já foram incluídos na nomenclatura da IUPAC. Assim, o secomposto é nomeado tanto como 4-(1-metiletil)heptano ou 4-isopropileptano



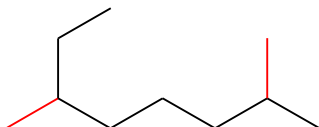
4-(1-Metiletil) heptano
ou **4-Isopropileptano**

Tente memorizar esses nomes, felizmente tem poucos deles.

Ao escrever o nome de um alcano, o prefixo *iso-* sem o hífen é considerado parte do nome do grupo alquila para fins de classificação em ordem alfabética, mas os prefixos *sec-* e *tert-* com hífen e em itálico não o são. Dessa forma, isopropila e isobutila são colocadas em ordem alfabética na letra “i” contudo *sec-butila* e *tert-butila* ficam em ordem alfabética na letra “b”.

Pratique a nomenclatura dos alcanos

Qual é o nome dado pela IUPAC para o seguinte alcano?



.....



Estratégia Encontre a cadeia carbônica contínua mais comprida na molécula e utilize-a como cadeia principal. Essa molécula tem uma cadeia de oito átomos de carbono (octano) com dois substituintes metila. Numerar pela extremidade mais próxima de um dos substituintes metila indica que os grupos metila ficam no C2 e C6.

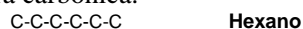
Solução**2,6-Dimetiloctano**

Estratégia
Solução

Convertendo um nome químico em uma estrutura

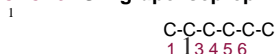
Escreva a estrutura do 3-isopropil-2-metilexano.

Este é o inverso do Problema anterior, portanto utilize a estratégia reversa. Veja o nome da cadeia principal (hexano) e escreva a estrutura carbônica.



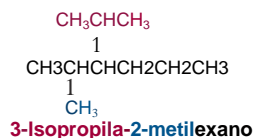
Agora, encontre os substituintes (3-isopropila e 2-metila) e coloque-os nos átomos de carbono adequados:

CH_3CHCH_3 - Um grupo isopropila no C3

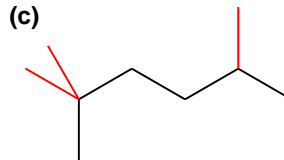
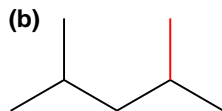
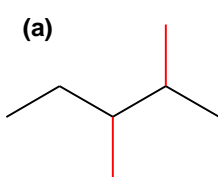


CH_3 - Um grupo metila no C2

Finalmente, adicione os átomos de hidrogênio para completar a estrutura.

**PROBLEMA**

Escreva os nomes IUPAC para os seguintes compostos:

**PROBLEMA**

Desenhe as estruturas correspondentes aos seguintes nomes IUPAC:

(a) 3,4-dimetilnonano

(b) 3-etil-4,4-dimetileptano

(e) 2,2-dimetil-4-propiloctano

(d) 2,2,4-trimetilpentano



II - Nomenclatura de Compostos Orgânicos Polifuncionais

Com mais de 30 milhões de compostos orgânicos já conhecidos e centenas criados diariamente, nomear cada um deles é realmente um problema. Parte do problema se deve à complexidade absoluta das estruturas orgânicas, mas parte também se deve ao fato de que os nomes químicos possuem mais de um propósito. Para o *Chemical Abstracts Service* (CAS), que cataloga e classifica a literatura química mundial, cada composto deve ter apenas um nome correto. Seria caótico se metade das entradas do CH_3Br fosse classificada em "M" de *methylbromide* e metade em "B" de *bromomethane*. Além do mais, um nome CAS precisa ser completamente sistemático para que possa ser atribuído e interpretado por computadores; a nomenclatura leiga não é permitida.

Entretanto, as pessoas possuem necessidades diferentes em relação aos computadores. Para as pessoas - em outras palavras, químicos em suas comunicações orais e escritas - é melhor que um nome químico seja pronunciável e que seja o mais fácil possível de se atribuir e interpretar. Além do mais, é conveniente que os nomes sigam os precedentes históricos, mesmo que isso signifique que um composto bem conhecido tenha mais de um nome. As pessoas poderão entender imediatamente que o bromometano e o brometo de metila fazem referência ao CH_3Br .

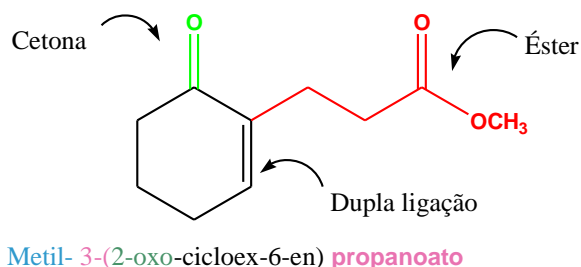
Como observado no texto, os químicos utilizam o sistema de nomenclatura desenvolvido e mantido pela *Internatinal Union of Pure and Applied Chemistry*, ou IUPAC, até a exaustão. As regras para a nomenclatura de compostos mono funcionais são dadas durante curso no momento em que um novo grupo funcional for introduzido, e a lista dessas regras pode ser encontrada na Tabela A.1.

Como o CAS é um sistema de catalogação na língua inglesa, mantivemos os nomes para CH_3Br em inglês para que o leitor entenda a confusão que seria gerada com a existência de dois nomes corretos (N.T.).

Química Orgânica – Indicar a estrutura correspondente ao grupo funcional indicado

TABELA A.1 Regras de nomenclatura para os grupos funcionais			
Grupo funcional	Estrutura	Grupo funcional	Estrutura
Anidridos ácidos		Compostos aromáticos	
Haletos ácidos		Ácidos carboxílicos	
Fosfatos de acila		Cicloalcanos	
Álcoois		Ésteres	
Aldeídos		Éteres	
Alcanos		Cetonas	
Alcenos		Nitrilas	
Haletos de alquila		Fenóis	
Alcinos		Sulfetos	
Amidas		Tioésteres	
Aminas		Tióis	

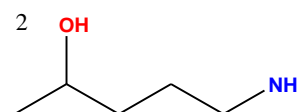
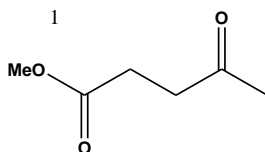
Nomear um composto monofuncional é razoavelmente simples, mas mesmo os químicos experientes encontram problemas quando se deparam com a nomenclatura de um composto polifuncional. Tenha como exemplo o composto a seguir. Ele possui três grupos funcionais, o éster, a cetona e a C=C, mas como nomeá-lo? Como um éster com terminação *-oato*, como uma cetona com terminação *-ona* ou como um alceno com terminação *-eno*? Ele na realidade possui a nomenclatura **metil-3-(2-oxocicloex-6-enil)propanoato**. ou **(3-(2-oxocicloex-6-enil)propanoato de metila**



O nome de uma molécula polifuncional orgânica possui quatro partes - **sufixo, principal, prefixos e localizadores** - que devem ser identificadas e expressas na ordem e no formato adequados. Vejamos cada um dos quatro.

PARTE 1 DO NOME. O SUFIXO: PRECEDÊNCIA DO GRUPO FUNCIONAL

Embora uma molécula orgânica polifuncional possa conter diversos grupos funcionais diferentes, devemos escolher apenas um sufixo para fins de nomenclatura. Não é correta a utilização de dois sufixos. Assim, o ceto éster **1** deve receber nomenclatura como uma cetona com sufixo *-ona* ou como um éster com sufixo *-oato*, mas não pode receber o nome como um *-onoato*. Da mesma maneira, o amino álcool **2** deve receber nomenclatura como um álcool (*-ol*) ou como uma amina (*-amina*), mas não pode receber o nome como *-olamina* ou *-aminol*.



A única exceção para essa regra que exige um sufixo simples é para o caso dos compostos nomeados possuírem ligações duplas ou triplas. Assim, o ácido insaturado $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{CO}_2\text{H}$ é o ácido but-3-enoico, e o álcool acetilênico $\text{HC}=\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ é o pent-4-in-1-ol.

Como escolhemos qual prefixo utilizar? Os grupos funcionais são divididos em duas classes, **grupos principais e grupos subordinados**, como mostrados na Tabela A.2. Os grupos principais podem ser citados como prefixo ou sufixos, enquanto os grupos subordinados são citados apenas como pre-**fixos**. Nos grupos principais, estabeleceu-se uma ordem de prioridade, com o sufixo próprio de um determinado composto fornecido por meio da escolha do grupo principal com prioridade mais alta. Por exemplo, a Tabela A.2 indica que o ceto éster **1** deve receber nomenclatura como um éster porque o grupo funcional éster tem prioridade mais alta que uma cetona. Da mesma maneira, o amino álcool **2** deve receber nomenclatura como um álcool, e não como uma amina.

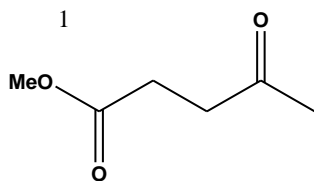


TABELA A.2 Classificação dos grupos funcionais*

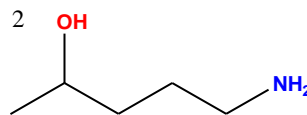
TABELA A.2 Classificação dos grupos funcionais		
Grupo funcional	Nomenclatura como sufixo	Nomenclatura como prefixo
Grupos principais		
Ácidos carboxílicos	Ácido-óico	carboxi
Anidridos ácidos	Anidrido -oico	
Ésteres	-oato -carboxilato	alcoxicarbonila
Tioésteres	-tioato -carbóioato	alquil tiocarbonila
Haleto ácidos	haleto-óila	haleto-carboníla
Amidas	-amida	-carbomoila
Nítrilas	-nitríla -carbonitrila	ciano
Aldeídos	-al carbaldeído	oxo
Cetonas	-ona	oxo
Alcoóis	-ol	hidroxi
Fenóis	-ol	hidroxi
Tióis	-tiol	mercapto
Aminas	-amina	amino
Iminas	-imina	imino
Éteres	-éter	alcoxi
Sulfetos	-sulfeto	alquiltio
Dissulfetos	-díssulfeto	
Alcenos	-eno	
Alcinos	-íno	
Alcanos	-ano	
Grupos subordinados		
Azidas	-	azido
Haleto	-	halo
Compostos nitro	-	nitro

Os grupos principais estão listados em ordem de prioridade decrescente; os grupos subordinados não possuem ordem de prioridade.

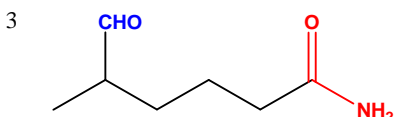
Assim, o nome de **1** é metil 4-oxopentanoato, e o nome de **2** é 5-amino-pentan-2-ol.
A seguir, mais exemplos:



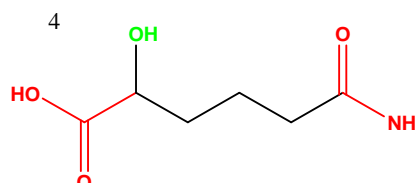
1. **Metil 4-oxopentanoato**
(um éster com um grupo cetona)



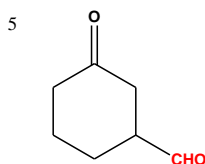
2. **5-aminopentan-2-ol**
(um álcool com um grupo amino)



3. **Metil 5-metil-6-oxoexanoato**
(um éster com um grupo aldeído)



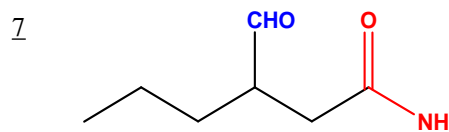
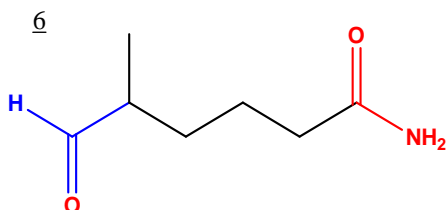
4. **Ácido 5-carbamoil-4-hidroxipentanoico**
(um ácido carboxílico com grupos amida e álcool)



5. **3-Oxocicloexanocarbaldeído**
(um aldeído com um grupo cetona)

PARTE 2 DO NOME. O PRINCIPAL: SELEÇÃO DA CADEIA OU DO ANEL PRINCIPAL

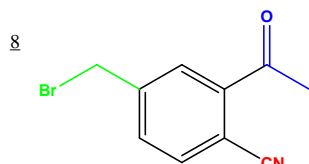
O nome principal, ou base, de um composto orgânico polifuncional geralmente é fácil de ser identificado. Se o grupo principal com prioridade mais alta faz parte de uma cadeia aberta, o nome principal é aquele da cadeia mais longa que contém o maior número de grupos principais. Por exemplo, os compostos 6 e 7 são amida-aldeído isoméricos, que devem receber, de acordo com a Tabela **A.2**, a nomenclatura amido e não aldeído. A cadeia mais longa no composto 6 possui seis carbonos, e a substância é nomeada como 5-metil-6-oxoexanamida. O composto 7 possui uma cadeia com seis carbonos, mas a cadeia mais longa que contém os dois grupos funcionais principais possui apenas quatro carbonos. O nome correto do 7 é 4-oxo-3-propilbutanamida.



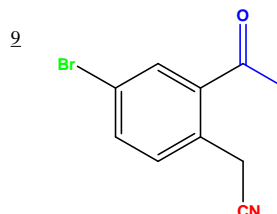
Se o grupo principal com prioridade mais alta é afixado no anel, o nome principal é o do sistema do anel. Os compostos 8 e 9, por exemplo, são nitrilas ceto isoméricas e as duas devem receber o nome de

acordo com a Tabela A.2. A substância 8 recebe o nome como uma benzonitrila porque o grupo funcional-CN é substituinte no anel aromático, mas a substância 9 recebe o nome como uma cetonitrila porque o grupo funcional-CN está na cadeia aberta.

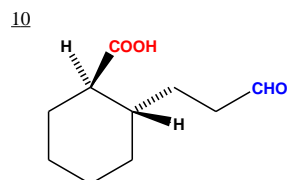
Os nomes corretos são 2-cetil-(4-bromometil)benzonitrila (8) e (2-acetil-4-bromofenil)acetoneitrila(9). Como próximos exemplos, os compostos 10 e 11 são cetoácidos e devem receber nomenclatura como ácidos, mas o nome principal no 10 é o mesmo do sistema do anel (ácido ciclohexanocarboxílico) e o nome principal no 11 é o mesmo da cadeia aberta (ácido propanoico). Os nomes completos são ácido trans-2-(3-oxopropil)ciclohexanocarboxílico (10) e ácido 3-(2-oxocicloexil)propanoico (11).



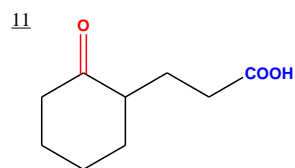
8.2-acetil-(4-bromometil)benzonitrila



9. (2-acetil-4-bromofenil) acetoneitrila



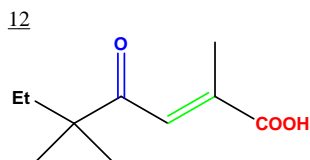
10. ácido trans-2-(3-oxopropil)ciclohexanocarboxílico



11. ácido 3-(2-oxocicloexil)propanoico

PARTE 3 E 4 DO NOME. OS PREFIXOS E LOCALIZADORES

Com o nome principal e o sufixo estabelecido, a próxima etapa é identificar e atribuir números, ou *localizadores*, a todos os substituintes na cadeia principal ou no anel. Esses substituintes incluem todos os grupos alquila e todos os grupos funcionais, exceto aquele citado no sufixo. Por exemplo, o composto 12 contém três grupos funcionais diferentes (carboxila, ceto e ligação dupla). Como o grupo carboxila possui prioridade mais alta e como a cadeia mais longa que contém os grupos funcionais possuem sete carbonos, o composto 12 é um ácido heptenoico. Além disso, a cadeia principal contém um substituinte ceto (oxo) e três grupos metila. Numerando a partir da extremidade mais próxima do grupo funcional com prioridade mais alta, o composto 12 recebe o nome ácido (E)-2,5,5-trimetil-4-oxo-ept-2-enoico. Rever outros compostos que nomeamos para exemplificar como os prefixos e localizadores são atribuídos.

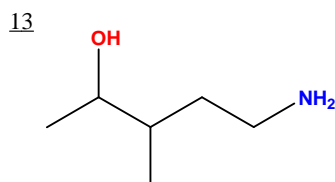


12. ácido (E)-2,5,5-trimetil-4-oxo-ept-2-enoico

ESCREVENDO O NOME

Com as partes do nome estabelecidas, o nome todo é escrito. Diversas regras adicionais são aplicadas:

1. **Ordem dos prefixos.** Quando os substituintes são identificados, a cadeia principal é numerada, e os multiplicadores próprios como *di-* e *tri-* são atribuídos, o nome é escrito com os substituintes listados em ordem alfabética em vez de em ordem numérica. Os multiplicadores como *di-* e *tri-* não são utilizados na ordem alfabética, mas o prefixo *iso-* é utilizado.



13. 5-amino-3-metilpentan-2-ol

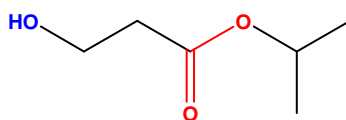
2. Utilização de hífen; nomes simples e nomes compostos. A regra geral é determinar se o principal é um elemento ou um composto. Se for um dos dois, seu nome terá apenas uma palavra; se não for nenhum dos dois, o nome terá mais de uma palavra. Por exemplo, o metilbenzeno é escrito com uma palavra porque o principal- *o benzeno* - é um composto por si só. Entretanto, o éter dietílico é escrito como palavra composta porque o principal- o éter - é um nome da classe, e não um nome de composto. A seguir, mais exemplos:

14



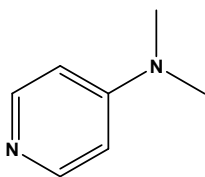
14. **Dimetil**magnésio
(uma palavra, pois o magnésio é um elemento)

15



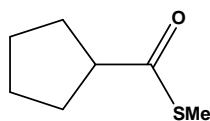
15. **Isopropil****3-hidroxi**propanoato
(duas palavras, pois o "propanoato" não é um composto)

16



16. **4-(dimetilamino)**piridina
(uma palavra, pois a piridina é um composto)

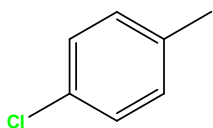
17



17. **Metil** ciclopentanocarboxiato
(duas palavras, pois o "ciclopentanocarboxiato" não é um composto)

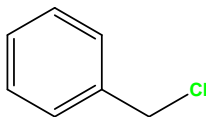
3. Parênteses. Os parênteses são utilizados para denotar os substituintes complexos quando possível, talvez, ocorrer ambigüidade. Por exemplo, o clorometilbenzeno possui dois substituintes em um anel de benzeno, mas o (clorometil)benzeno tem apenas um substituinte complexo. Observe que a expressão em parênteses não é separada por hífen do restante do nome.

18



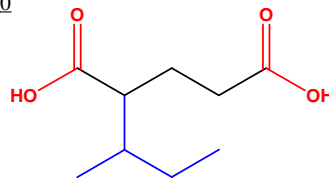
18. **p-Cloro****metil**benzeno

19



19. **(Clorometil)** benzeno

20



20. **ácido 2-(1-metilpropil)** pentanodioico

LEITURA COMPLEMENTAR

Informações mais detalhadas sobre as regras de nomenclatura em química orgânica podem ser encontradas on-line, em <http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/>, e nas seguintes referências:

1. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds*. Boca Raton, FL: CRC Press, 1993.
2. *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H*. International Union of Pure and Applied Chemistry. Oxford: Pergamon Press, 1979.