

NOMENCLATURA DOS COMPOSTOS ORGÂNICOS

R. Bicca de Alencastro

*Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro
Rio de Janeiro, R.J. - Brasil*

(Recebido em 14/11/80)

1. INTRODUÇÃO

Poucos discutiriam a necessidade da nomeação adequada, não somente do instrumental ou das técnicas experimentais usadas na pesquisa química, como também, e principalmente, dos compostos consumidos ou produzidos nas experiências que são objeto da comunicação científica ou da teorização conseqüente ao acúmulo de informações que, em última análise, correspondem ao conteúdo fundamental da Ciência da Química. Parece até mesmo óbvia a necessidade de um acordo neste sentido, a nível de comunidade científica.

Foi em 1892, em Genebra, que primeiro apareceram regras internacionais de nomenclatura química, pelo menos no que se refere à Química Orgânica. Mais tarde, com o aumento extraordinário do número de compostos, os mais diversos, tornou-se necessária a reavaliação de critérios e a ampliação do texto das regras. Assim, a União Internacional de Química promoveu as reuniões de Liège (1930), Madrid (1932), Lucerna (1936) e Roma (1938). Foi apenas na reunião de Londres (1947), entretanto, que uma comissão especial de nomenclatura, em caráter permanente, encarregou-se da revisão das regras propostas, de modo a compor as "Regras Definitivas para a Nomenclatura em Química Orgânica", publicadas inicialmente em sua versão inglesa pelo *Journal of American Chemical Society*¹. Outras comissões foram escolhidas na ocasião e relatórios sobre a nomenclatura em Química Inorgânica², Físico-Química³ e Bioquímica⁴ foram igualmente publicados. A Sociedade Americana de Química, em colaboração com a Sociedade Química (Londres), propuseram, ainda, um sistema de nomenclatura para carboidratos⁵.

No Brasil, alguns esforços isolados foram feitos para a adaptação das regras à língua portuguesa. Merecem menção os trabalhos de Rothe, Defini e Lacaz (1955) e Militino Rosa, sumariados nos Anais da Associação Brasileira de Química⁶. Todavia, nenhum trabalho sistemático foi desenvolvido. Na reunião de 1978, em São Paulo, decidiu a Assembléia da Sociedade Brasileira de Química recomendar que esforços fossem realizados neste sentido. O que se segue é uma contribuição ao estabelecimento de regras operacionais para a nomenclatura de química orgânica que sejam de fácil utilização por especialistas, professores e alunos*.

Pretende-se apresentar nesta primeira parte os princípios gerais que nortearam o trabalho de adaptação ao português das Regras Definitivas de 1960, assim como as regras referentes aos hidrocarbonetos acíclicos, monocíclicos e policíclicos fundidos, após o que serão sucessivamente apresentados os hidrocarbonetos em ponte, espiranos, demais sistemas anelares e terpenos, sistemas heterocíclicos, e séries funcionais.

Na elaboração da proposta ora apresentada apareceram, evidentemente, algumas dificuldades. A primeira delas é que vários sistemas de nomenclatura são possíveis e aceitáveis. Foram considerados aceitáveis os sistemas recomendados pelos Relatórios de 1957 e 1965 da comissão da UIQPA^{1,7}. Maior dificuldade foi a adaptação à língua vernácula: respeitou-se a norma em vigor, embora fossem adotadas certas liberdades, visando à clareza. Deve o leitor lembrar-se de que, no fundo, a nomenclatura química é um sistema artificialmente inserido na língua, não passando, portanto, de um imenso, porém sistemático e coerente, neologismo. Dessas liberdades, a mais evidente é o uso sistemático do hífen. A base de tal procedimento é uma interpretação livre e ampla dos itens 45 e 46 (XIV - Uso do hífen) do formulário ortográfico, aprovado em 12 de agosto de 1943 pela Academia Brasileira de Letras. Encontrar-se-á nesta série de artigos uma seção em que são apresentados os princípios gerais utilizados pela comissão da UIQPA, bem como um glossário. Esta parte, mesmo não dependendo de tradução ou adaptação não poderia ser excluída de um trabalho de divulgação. O restante da série obedece aos Relatórios originais, e as regras são acompanhadas, por vezes, de comentários julgados pertinentes pelo autor.

2. PRINCÍPIOS GERAIS E GLOSSÁRIO¹

"As regras ora apresentadas pretendem conferir coerência às atividades de redação e indexação de textos técnico-científicos (embora talvez menos na comunicação oral, onde, com freqüência, prefere-se o uso de nomes triviais), e serão apresentados em grupos, como recomendado pela UIQPA. O trabalho da comissão não pretendeu ser exaustivo e as regras limitam-se a tipos de compostos individuais. Onde, por alguma razão, a limitação a um único método de nomenclatura parece indesejável ou impossível foram fornecidas alternativas, porém a Comissão sugeriu que fosse tentada a eliminação progressiva das alternativas, em favor do sistema mais aceitável. A Comissão sugeriu, igualmente, aos químicos orgânicos de cada país que tentem reduzir as variações de nomenclatura com respeito à grafia, à posição dos números, à pontuação, à separação, às abreviações, à elisão de vogais, etc. As regras foram escritas segundo as convenções do Chemical Abstracts (exceto se especificamente

* Colocada assim, a questão em termos de proposta, muito agradeceria o autor o debate e a crítica de seus colegas no sentido de aperfeiçoar o presente texto e conferir dinâmica ao processo de estabelecimento de uma linguagem comum para a Química em nosso País.

mencionado o contrário). A Comissão limitou-se, ainda e principalmente, a codificar práticas já estabelecidas e não a criar uma nova nomenclatura.

Com isto em mente, a Comissão norteou-se pelas seguintes normas principais: (a) o menor número possível de modificações deveria ser feito na nomenclatura existente, embora devessem prevalecer a clareza e a funcionalidade; (b) as regras e nomes deveriam ser unívocos e únicos, embora simples e conclusos; (c) o uso anterior das diversas possibilidades deveria ser cuidadosamente avaliado; (d) as regras deveriam ser coerentes entre si, e ao mesmo tempo auxiliar a comunicação entre os diversos campos da química, e serem, ainda, capazes de permitir ampliações com o progresso da ciência; (e) os nomes triviais e os nomes pouco sistemáticos somente não deveriam ser eliminados quando de utilização muito comum. Nos demais casos, deveriam ser substituídos por nomes sistemáticos (ou, pelo menos, mais sistemáticos). A criação de novos nomes triviais deveria ser evitada; (f) as regras e nomes deveriam ser adaptáveis às diferentes línguas."

Glossário – *Nome principal* – nome do qual um nome particular é derivado de acordo com determinados procedimentos (Exemplo: etanol vindo de etano). Frequentemente, os nomes particulares tem mais de um nome principal (Exemplo: cloro-metil-ciclo-hexano, vindo de metil-ciclo-hexano, vindo, por sua vez, de ciclo-hexano, proveniente de hexano).

Nome trivial – nome em que nenhuma parte está relacionada a uma sistemática geral de nomenclatura (Exemplo: xantofila, clorofila).

Nome semi-sistemático ou semi-trivial – nome em que apenas uma parte está ligada a uma sistemática geral de nomenclatura (Exemplo: metano, calciferol).

Nome substituído – nome que envolve a substituição de um hidrogênio por um grupo ou outro elemento (Exemplo: 1-metil-naftaleno, 1-pentanol).

Nome de reposição – nome em que C, CH ou CH₂ são substituídos por um heteroátomo (Exemplo: 2,7,9-triazafenantreno).

Nome subtrativo – nome envolvendo a remoção de grupos de átomos específicos (Exemplo: hexeno, hexino, nomes envolvendo os prefixos anidro, desoxi, etc.).

Nome radico-funcional – nome formado pelos nomes de um radical e de uma classe funcional (Exemplo: cloreto de acetila, álcool etílico).

Nome aditivo – nome representando adição entre moléculas e átomos (Exemplo: óxido de estireno).

Nome conjuntivo – nome formado pela junção dos nomes de duas moléculas ligadas por perda de um átomo de hidrogênio de cada uma (Exemplo: ácido naftaleno-acético).

Nome de fusão – nome usado em sistemas cíclicos, formado por um prefixo correspondente a um dos anéis com terminação o, ligado ao nome principal correspondente ao restante da molécula, estando implícito que a ligação entre ambos é feita por mais de um átomo comum (Exemplo: benzofurano).

Nome segundo Hantzsch-Widman – nome utilizado para sistemas heterocíclicos formado, de acordo com as regras estabelecidas por Hantzsch e Widman^{8,9}, por um prefixo ou prefixos (que indiquem a existência de um ou mais heteroátomos) e os sufixos *ola* ou *ina* para indicar a existência de um anel de cinco ou seis átomos, respectivamente (Exemplo: triazola, tiazola).

3. REGRAS DE NOMENCLATURA: A – HIDROCARBONETOS

3.1. Hidrocarbonetos acíclicos

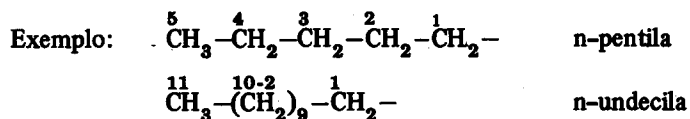
3.1.1. Os primeiros quatro hidrocarbonetos saturados lineares acíclicos são chamados metano, etano, propano e butano. Os termos superiores da série são nomes sistemáticos formados por prefixos numéricos e o sufixo *ano*. O nome geral da série é "alcano"*.

Exemplos: (n = número total de carbonos).

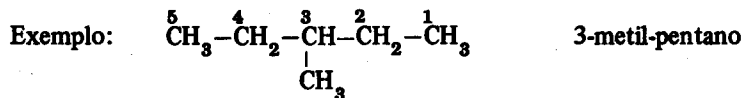
n			
1	metano	13	tridecano
2	etano	14	tetradecano
3	propano	15	pentadecano
4	butano	16	hexadecano
5	pentano	20	eicosano
6	hexano	21	heneicosano
7	heptano	22	docosano
8	octano		
9	nonano		
10	decano		
11	undecano		
12	dodecano		
		23	tricosano
		24	tetracosano
		25	pentacosano
		30	triacontano
		31	hentriacontano
		32	dotriacontano
		33	tritriacontano
		34	tetratriacontano
		40	tetracontano
		41	hentetracontano
		50	pentacontano
		90	nonacontano
		100	hectano
		101	hen-hectano
		132	dotriconta-hectano

* Observe-se a diferença entre C₁₁ e C₂₁, por exemplo. Note-se, ainda, a hifenação em C₁₀₁ e C₁₃₂ de preferência à elisão, que daria henectano e triacontectano, talvez mais correta, porém provocando perda parcial de sentido.

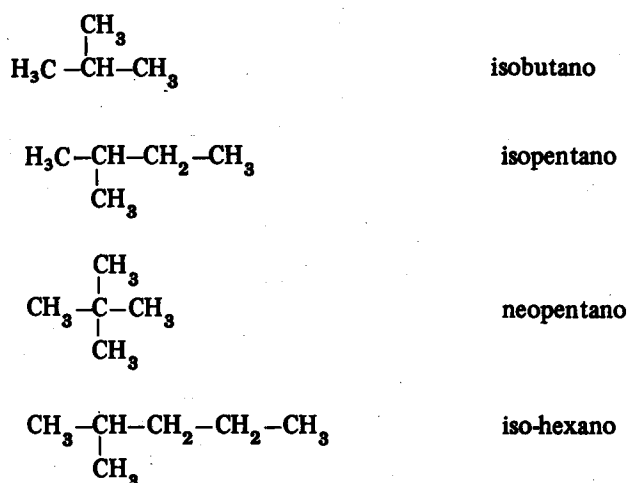
3.1.2. Radicais univalentes derivados de hidrocarbonetos acíclicos saturados não ramificados, obtidos pela remoção de um átomo de hidrogênio de um carbono terminal, têm o nome principal do hidrocarboneto, substituída a terminação ano por ila. O átomo de carbono com a valência livre recebe o número 1 na seqüência de numeração. Estes radicais recebem o nome geral de radical alquila normal (n-alquila) ou radical alquila não ramificado.



3.1.3. Um hidrocarboneto acíclico saturado ramificado é nomeado colocando-se o prefixo correspondente à cadeia lateral diante do nome da cadeia mais longa. Quando necessário, localiza-se a cadeia lateral pelo número do carbono da cadeia principal a que está ligada.

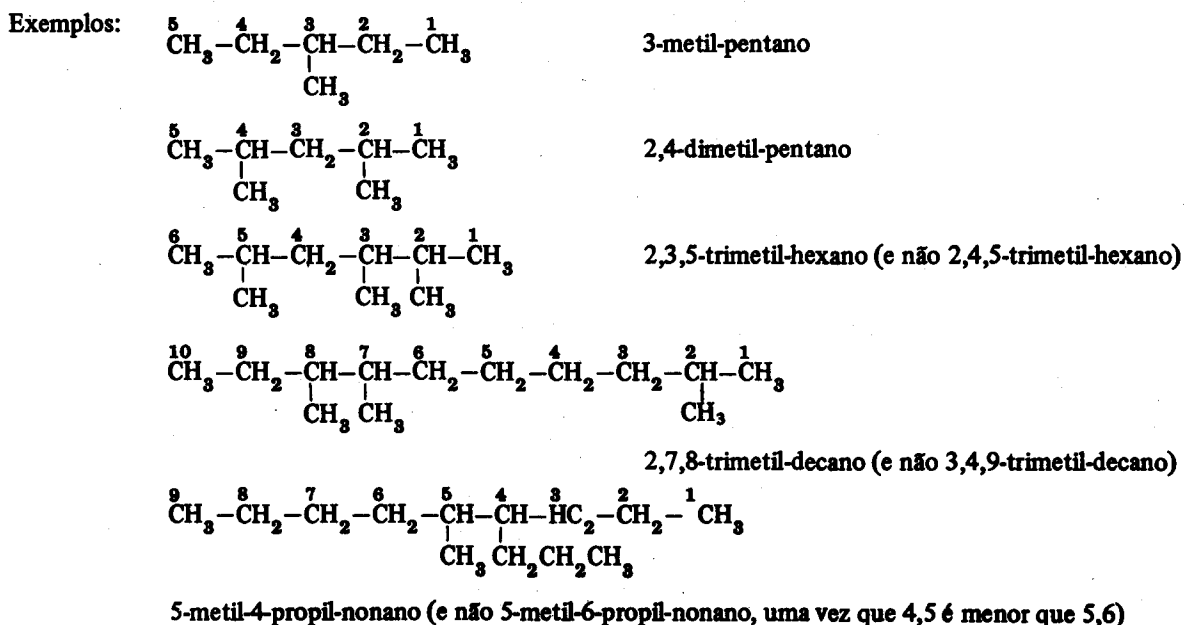


Os nomes assim obtidos podem ser substituídos por nomes semi-sistemáticos nos seguintes casos:

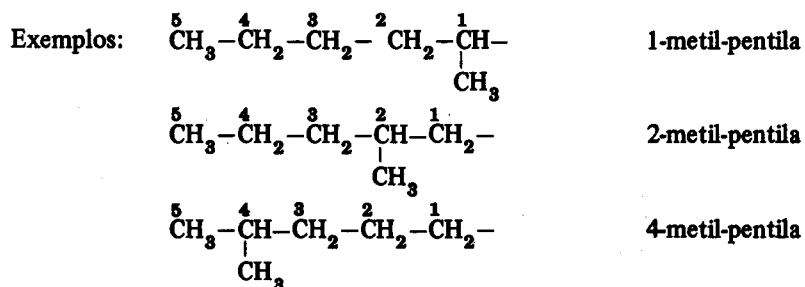


O Chemical Abstracts, contudo, não admite o uso destes nomes semi-sistemáticos.

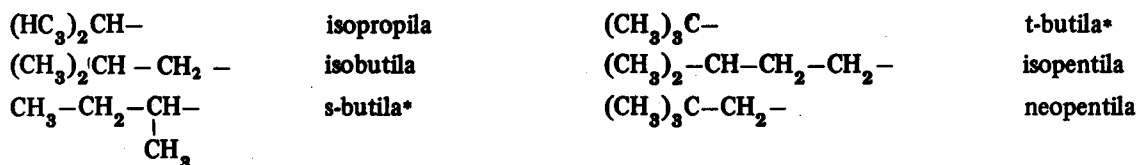
3.1.4. A cadeia mais longa é numerada de um extremo a outro por algarismos arábicos. A direção escolhida é sempre a que der menores números às cadeias laterais. Na aplicação da presente regra, compara-se as possíveis cadeias principais quanto aos átomos de carbono e escolhe-se como a de "menor" numeração aquela que tiver o menor número na cadeia principal por ocasião da primeira diferença. Este princípio é aplicável qualquer que seja a natureza do substituinte.



3.1.5. Radicais univalentes ramificados derivados de alcanos são nomeados utilizando-se como cadeia principal a de maior número de átomos de carbono e numerando-se a partir do átomo contendo a valência livre. As cadeias laterais são nomeadas independentemente e os nomes são colocados diante do nome da cadeia principal, com a numeração adequada à sua localização.



São mantidos os seguintes nomes:



3.1.6 Se duas ou mais cadeias laterais estão presentes nas moléculas, elas devem ser citadas (a) na ordem de complexidade crescente ou (b) na ordem alfabética.

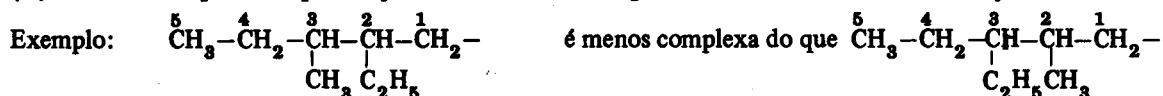
(a) As cadeias laterais são arranjadas em ordem crescente de complexidade, aplicando-se sucessivamente os seguintes critérios até ser possível uma decisão:

(i) A menos complexa é a que contém o menor número total de átomos de carbono. Exemplo: $(\text{CH}_3)_2\text{C}-$ é menos complexa do que $\text{CH}_3 - (\text{CH}_2)_4 - \text{CH}_2 -$

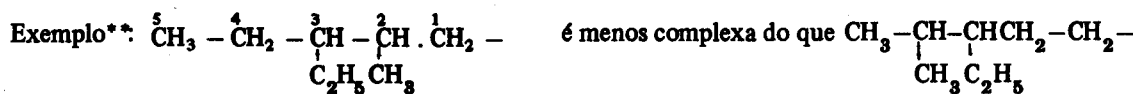
(ii) A menos complexa é a que contém a cadeia linear mais longa.



(iii) A menos complexa é aquela cujo substituinte mais longo tem o menor número de colocação:



(iv) A menos complexa é aquela cujo próximo substituinte mais longo tem menor número de colocação:



(v) A menos complexa é a menos insaturada.

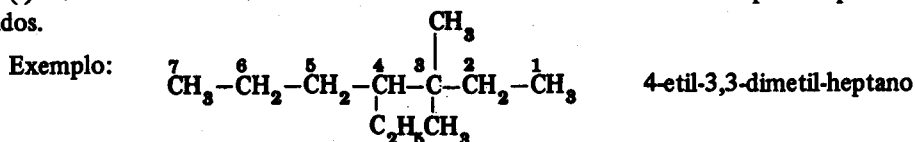


(vi) A menos complexa é aquela em que a insaturação tem o menor número de localização.



(b) A ordem alfabética é decidida segundo um dos critérios seguintes:

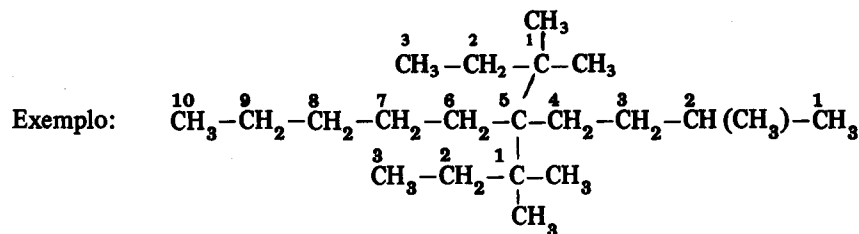
(i) Os nomes dos radicais são colocados em ordem alfabética e só depois os prefixos indicativos de quantidades são colocados.



(ii) Os nomes dos radicais são listados na ordem alfabética de seu nome completo.

* Adotou-se s-butila e t-butila, de preferência a sec-butila e ter-butila, mais tradicionais, por uma questão de eufonia.

** Repare que o substituinte mais comprido (regra iii) tem o mesmo número de colocação em ambos os casos.

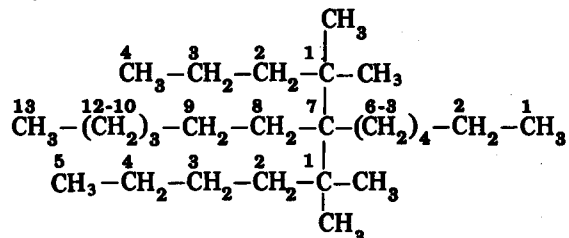


(a) Nome com uso de primos e ordem de complexidade: 2-metil-5,5-bis-1',1'-dimetil-propil-decano

(b) Nome com parênteses e ordem alfabética: 5,5-bis(1,1-dimetil-propil)-2-metil-decano

(c) Nome com uso de primos e ordem alfabética: 5,5-bis-1',1'-dimetil-propil-2-metil-decano

Observação: O Chemical Abstracts usa parênteses e a ordem alfabética sem primos. O nome do composto seria então 2-metil-5,5-di-t-pentil-decano. Observe que quando se usa os prefixos bis, tris, etc. e parênteses, o prefixo não é separado do parênteses por hífen.



a) Nome com uso de primos e ordem de complexidade:

7,1',1'-dimetil-butil-7,1'',1''-dimetil-pentil-tridecano

b) Nome com parênteses e ordem alfabética:

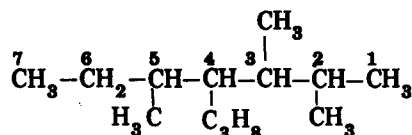
7(1,1-dimetil-butil)-7-(1,1-dimetil-pentil)-tridecano

3.1.9. Se várias cadeias do mesmo tamanho podem constituir alternativas para seleção da cadeia principal, a decisão é feita pelas seguintes normas, na ordem:

(a) A cadeia que contiver o maior número de ramificações:

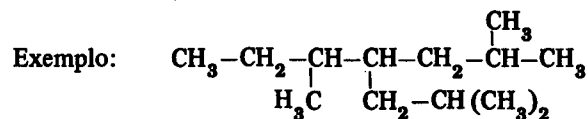
Exemplo:

Exemplo:



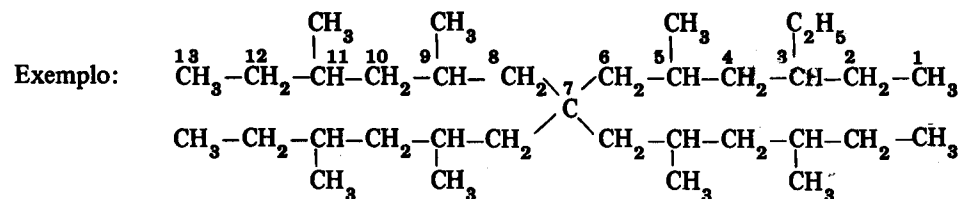
4-propil-2,3,5-trimetil-heptano (ordem alfabética) ou 2,3,5-trimetil-4-propil-heptano (ordem de complexidade)

(b) A cadeia cujas cadeias laterais têm os menores números de locação.



2,5-dimetil-4-isobutil-heptano

(c) A cadeia que tem o maior número de carbonos nas menores cadeias laterais.



7,7-bis(2,4-dimetil-hexil)-3-etil-5,9,11-trimetil-tridecano

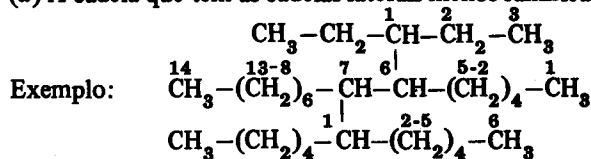
Observação: A escolha entre as cadeias principais possíveis, neste caso, é feita entre duas cadeias, cada uma contendo seis cadeias laterais nas mesmas posições. Escrevendo, na ordem crescente, o número de átomos de carbono das várias cadeias das duas possibilidades temos:

Primeira possibilidade 1,1,1,2,8,8

Segunda Possibilidade 1,1,1,1,8,9

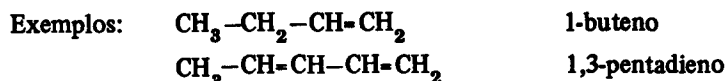
A expressão "maior número de carbonos nas menores cadeias laterais" implica em que a maior cadeia lateral, no primeiro ponto de diferença, estabelece a prioridade da cadeia principal correspondente. No presente caso, a distinção é feita na quarta cadeia lateral, em que a primeira possibilidade tem 2 carbonos e a segunda apenas 1.

(d) A cadeia que tem as cadeias laterais menos ramificadas.



6-(1-etil-propil)-7-(1-pentil-hexil)-tetradecano

3.1.10. Os hidrocarbonetos acíclicos insaturados não ramificados que possuem uma dupla ligação recebem o nome resultante da substituição da terminação "ano", do hidrocarboneto saturado correspondente, pela terminação "eno". Havendo mais de uma dupla ligação, as terminações passam a ser "-adieno, -atrieno, etc.". Os nomes gerais destes hidrocarbonetos (ramificados ou não) são "alqueno", "alcadieno", "alcatrieno", etc. A cadeia principal é numerada de modo a dar às ligações duplas os menores números possíveis (independentemente das ramificações).



Mantêm-se os seguintes nomes não sistemáticos, consagrados pelo uso:

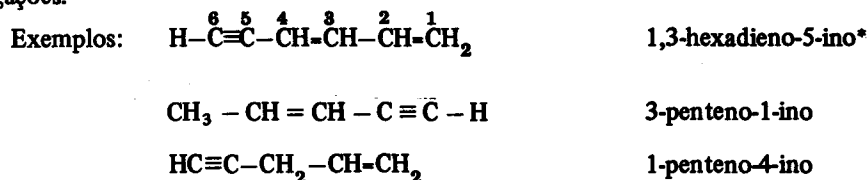


Observação: O Chemical Abstracts utiliza "aleno" apenas para o hidrocarboneto não substituído.

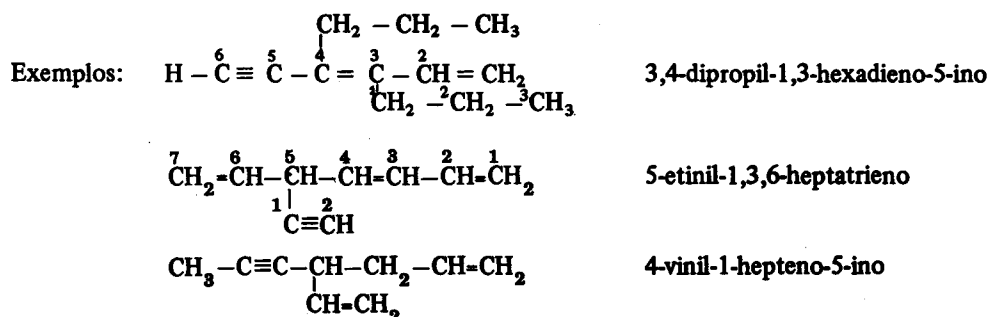
3.1.11. Os hidrocarbonetos acíclicos insaturados não ramificados que possuem uma ligação tripla recebem o nome resultante da substituição da terminação "ano", do hidrocarboneto saturado correspondente, pela terminação "ino". Havendo duas ou mais ligações triplas, os sufixos passam a ser "adiino", "atriino", etc. Os nomes genéricos desses hidrocarbonetos são "alquino", "alcadiino", "alcatriino", etc. A cadeia é numerada de modo a dar os menores números possíveis às ligações duplas.

Mantêm-se o nome acetileno para $\text{H} - \text{C} \equiv \text{C} - \text{H}$.

3.1.12. Os hidrocarbonetos acíclicos insaturados não ramificados que possuem ligações duplas e triplas recebem o nome resultante da substituição do sufixo "ano" do hidrocarboneto acíclico saturado correspondente pela terminação "enino", "adienino", "atrienino", "enodiino", "enotriino", etc. Os números mais baixos possíveis são dados às insaturações, mesmo que isto possa dar ao "ino" um número do que ao "eno". Quando for possível escolher, prefere-se dar o menor número às duplas ligações.



3.1.13. Os hidrocarbonetos insaturados acíclicos ramificados são nomeados como derivados do hidrocarboneto não ramificado com o maior número possível de ligações duplas e triplas. Se duas ou mais cadeias principais puderem ser escolhidas, prefere-se (a) a que contém o maior número de átomos de carbono; (b) aquela que contém o número máximo de duplas ligações. Aplicam-se as mesmas regras apresentadas para os hidrocarbonetos acíclicos ramificados saturados em todos os demais aspectos.



Observação: Mantêm-se o nome vulgar "isopreno" apenas para o composto não substituído $\text{CH}_2 = \text{CH} - \underset{\text{CH}_3}{\text{C}} - \text{CH}_3$

3.1.14. Os nomes de radicais univalentes derivados de hidrocarbonetos acíclicos insaturados têm as terminações "enila", "inila", "dienila", etc. As posições das ligações duplas e triplas são indicadas quando necessário. O átomo de carbono com a valência livre recebe o número 1.

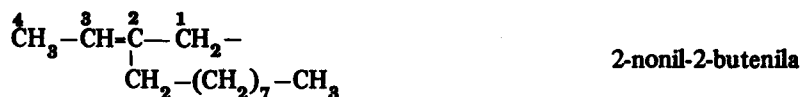
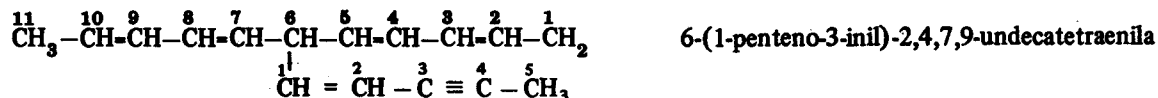
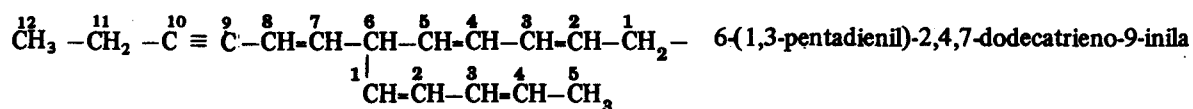
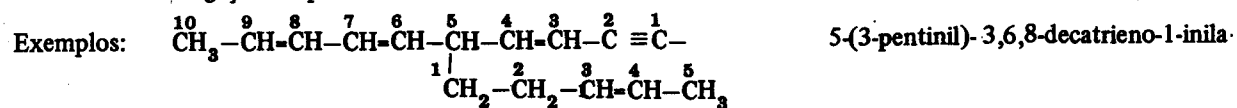
* Por uma questão de eufonia prefere-se, por exemplo, 3-penteno-1-ino a 3-penten-1-ino.

Exemplo:	$\text{HC}\equiv\text{C}-$	etinila
	$\text{CH}_3-\text{CH}-\text{HC}-$	1-propenila
	$\text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}_2-$	2-propinila
	$\overset{5}{\text{CH}_2}-\overset{4}{\text{CH}}-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{2}{\text{CH}}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$	2,4-pentadienila
	$\text{H}_2\text{C}=\overset{4}{\text{CH}}-\overset{3}{\text{C}}\equiv\overset{2}{\text{C}}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$	2-pentino-4-enila
	$\text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-$	2-pentino-4-inila

Exceções: Mantém-se os seguintes nomes:

$\text{CH}_2-\text{CH}-$	vinila (ou etenila)
$\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2-$	alila (ou 2-propenila)
$\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}-$	isopropenila (ou 1-metil-vinila)

3.1.15. Quando existem várias possibilidades de escolha da cadeia principal de um radical insaturado, prefere-se (a) a que contém o número maior de ligações duplas e triplas; (b) a que tem o número maior de átomos de carbono; e (c) a que contém o número maior de ligações duplas.



3.1.1.6. Os radicais bivalentes e trivalentes provenientes de radicais hidrocarbônicos acíclicos, cujos nomes terminam em *ila*, por remoção de um ou dois hidrogênios do átomo de carbono com as valências livres, são nomeados pela adição dos sufixos “-ideno” ou “-idino”, após elisão do *a* do nome do radical univalente correspondente. O átomo de carbono com as valências livres tem o número 1.

Retém-se o nome metileno para o radical CH_2- .

Exemplos:	$\text{HC}\equiv$	metilidino (ou metino)
	$\text{CH}_3-\text{CH}\equiv$	etilidino
	$\text{CH}_2-\text{CH}-$	etilideno
	$\text{CH}_2-\text{C}-$	vinilideno
	$(\text{CH}_3)_2\text{C}-$	isopropilideno

3.1.1.7. Os nomes de radicais bivalentes derivados de alcanos normais pela remoção de um átomo de hidrogênio de cada um dos átomos terminais de cadeia são etileno, trimetileno, tetrametileno, pentametileno, etc.

Exemplos:	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	pentametileno
	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	hexametileno

Aos nomes dos radicais bivalentes se aplicam as regras 3.1.2. e 3.1.3.

Exemplos:	$-\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_2\text{CH}_3}{\text{CH}_2}-$	etil-etileno
-----------	--	--------------

Observação: Mantém-se o nome “propileno” para o radical: $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2$

3.1.18. Os radicais bivalentes derivados de alquenos, alcadienos, alquinos, etc., pela remoção de um hidrogênio de cada um dos átomos de carbono terminais têm o nome resultante de substituição dos sufixos “-eno”, “-ino”, etc. por ileno, ilino, etc. As posições das ligações duplas e triplas são indicadas, se necessário.

Exemplo: $-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$ propenileno

O nome “vinileno” é mantido para etenileno $-\text{CH}=\text{CH}-$.

Os nomes dos radicais bivalentes substituídos são derivados de acordo com a regra 3.1.10.

Exemplo: $-\overset{5}{\text{CH}_2}-\overset{4}{\underset{\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3}{\text{C}}}-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{2}{\text{CH}}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$ 4-propil-2-pentenileno

3.1.19. Os radicais trivalentes, quadrivalentes, etc., derivados de hidrocarbonetos acíclicos de dois ou mais carbonos com as valências livres nas extremidades de cadeia têm o nome do radical monovalente acrescido do sufixo “ideno” para os bivalentes e “idino” para os trivalentes (com as valências livres no mesmo carbono). Se carbonos terminais com diferentes valências livres estão presentes, são citados e numerados na ordem “il”, “ilideno”, “ilidino”.

Exemplos: $-\overset{4}{\text{CH}}-\overset{3}{\text{CH}_2}-\overset{2}{\text{CH}_2}-\overset{1}{\text{CH}}-$ butanodiilideno
 $=\overset{4}{\text{C}}-\overset{3}{\text{CH}_2}-\overset{2}{\text{CH}_2}-\overset{1}{\text{C}}\equiv$ butanodiilidino
 $-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{2}{\text{CH}_2}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$ 1-propanil-3-ilideno
 $=\overset{3}{\text{C}}=\overset{2}{\text{C}}-\overset{1}{\text{C}}=$ propadienodiilideno
 $\equiv \overset{5}{\text{C}}-\overset{4}{\text{CH}_2}-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{2}{\text{CH}}-\overset{1}{\text{C}}\equiv$ 2-pentenodiilidino
 $\equiv \overset{4}{\text{C}}-\overset{3}{\text{CH}_2}-\overset{2}{\text{CH}_2}-\overset{1}{\text{CH}}=$ 1-butanilideno-4-ilidino

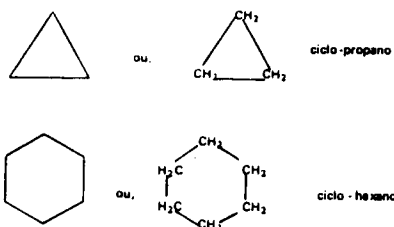
3.1.20. Os radicais multivalentes com valências livres em três ou mais carbonos têm o nome do hidrocarboneto correspondente acrescido dos sufixos “triila”, “tetraila”, “diilideno”, “diilideno”, etc.

Exemplos: $-\overset{3}{\text{CH}_2}-\overset{2}{\underset{\text{CH}}{\text{C}}}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$ 1,2,3-propanotriila
 $-\overset{3}{\text{CH}_2}-\overset{2}{\underset{\text{C}}{\text{C}}}-\overset{1}{\text{CH}_2}-$ 1,3-propanodiil-2-ilideno

3.2. Hidrocarbonetos monocíclicos

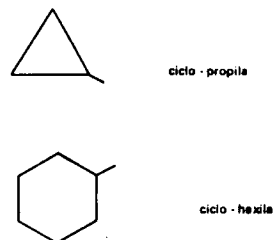
3.2.1. Os nomes dos hidrocarbonetos saturados monocíclicos (sem cadeias laterais) são formados pela anteposição do prefixo “ciclo” ao nome do hidrocarboneto linear saturado que contém o mesmo número de átomos de carbono. O nome genérico dos hidrocarbonetos saturados monocíclicos (com ou sem cadeias laterais) é “ciclo-alcano”^{*}.

Exemplos:



3.2.2. Os radicais univalentes derivados de ciclo-alcanos (sem cadeias laterais) são nomeados pela substituição da determinação “ano”, do nome do hidrocarboneto, por “ila”. O átomo de carbono com a valência livre recebe o número 1. O nome genérico destes radicais é “ciclo-alquila”.

Exemplos:

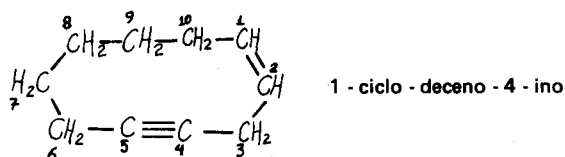
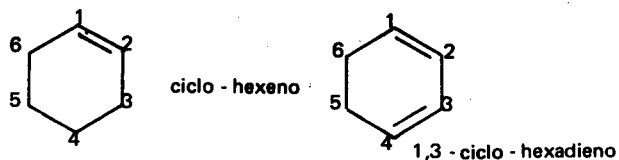


* Observe-se o uso do hífen, justificado por razões de ordem linguística (separando “h” mudo no meio de palavras como em ciclo-hexano e ciclo-heptano, e, por extensão, nos outros casos). Uma segunda razão para a hifenação é o fato da palavra “ciclo” constituir elemento estrutural importante e independente. As fórmulas abreviadas são de uso generalizado na literatura.

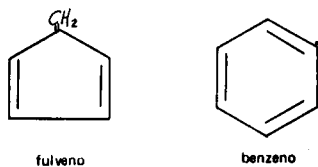
3.2.3. Os nomes dos hidrocarbonetos monocíclicos insaturados (sem cadeias laterais) provêm do nome dos ciclo-alcanos correspondentes pela substituição do sufixo “ano”, por “eno”, “adieno”, “atrieno”, “ino”, “adiino”,

etc. As duplas e triplas ligações recebem os menores números possíveis.

Exemplos:

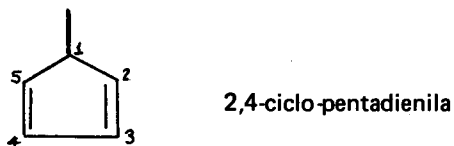
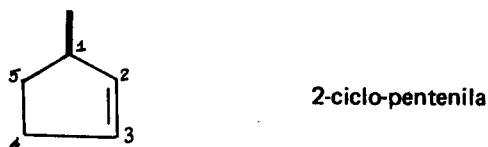


Observação: Mantêm-se os nomes "fulveno" (para o metileno-ciclo-pentadieno) e "benzeno".

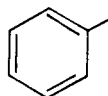


3.2.4. Os nomes dos radicais univalentes derivados dos hidrocarbonetos cíclicos insaturados têm as terminações "enila", "dienila", "inila", etc. As posições das ligações duplas e triplas são indicadas, segundo o estabelecido na regra 3.1.9. O átomo de carbono com a valência livre tem sempre o número 1, exceto no caso de terpenos, onde se aplicam regras especiais.

Exemplos:

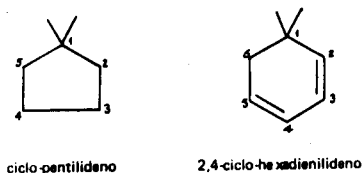


Observação: Mantêm-se o nome "fenila" para o radical univalente derivado do benzeno.



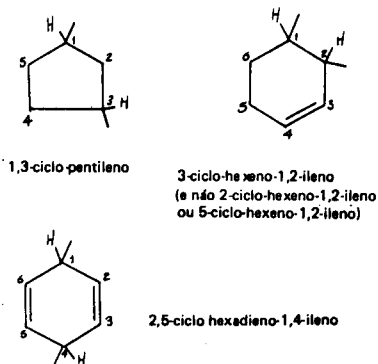
3.2.5. Os nomes dos radicais bivalentes derivados de hidrocarbonetos monocíclicos, saturados ou insaturados, com duas valências livres no mesmo átomo de carbono provêm da substituição das terminações "ano", "eno", "ino", por "ilideno", "enilideno", "inilideno", respectivamente. O átomo de carbono com as valências livres recebe o número 1 (exceto no caso de terpenos).

Exemplos:

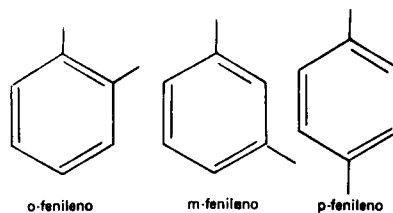


3.2.6. Os radicais bivalentes derivados de hidrocarbonetos monocíclicos, saturados ou insaturados, em que as duas valências livres estão em átomos de carbono diferentes no anel, são nomeados através da substituição dos sufixos "ano", "eno", "dieno", "ino", etc., na nomenclatura do hidrocarboneto correspondente por "ileno", "enileno", "dienileno", "inileno", etc. As posições com as valências livres recebem os menores números possíveis.

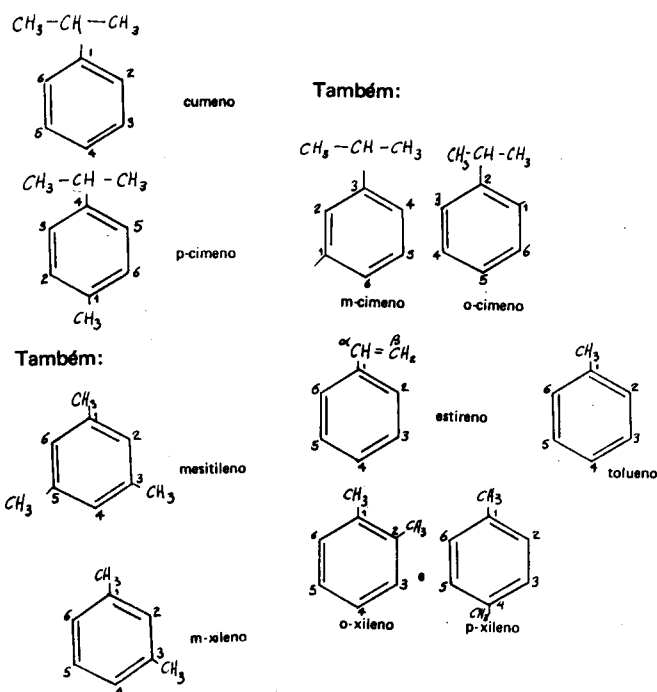
Exemplos:



Observação: Mantêm-se o nome "fenileno" para os radicais bivalentes derivados do benzeno.



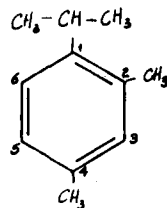
3.2.7. Mantêm-se para os hidrocarbonetos aromáticos monocíclicos substituídos os nomes dados a seguir:



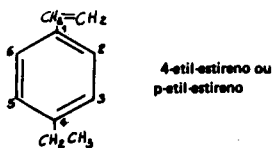
3.2.8. Os demais hidrocarbonetos aromáticos monocíclicos são nomeados como derivados do benzeno ou de algum dos compostos listados na regra anterior. Entretanto, caso o substituinte introduzido na molécula for idêntico a um já existente, o composto é nomeado como derivado do benzeno.

Observação: O Chemical Abstracts faz exceção à última parte da regra aceitando compostos principais maiores.

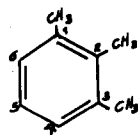
Exemplo:



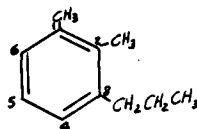
é listado como 2,4-dimetil-cumeno e não como 4-isopropil-1,3-dimetil-benzeno.



4-etil-estireno ou p-etil-estireno



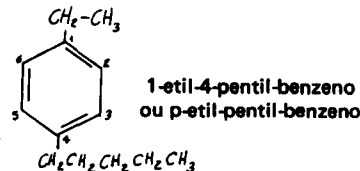
1, 2, 3 - trimetil-benzeno (e não 3-metil-o-xileno ou 2, 3-dimetil-tolueno)



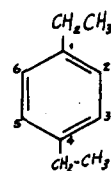
1, 2-dimetil-3-propil-benzeno (e não 3-propil-o-xileno)

3.2.9. A posição dos substituintes nos hidrocarbonetos aromáticos é indicada por números. No caso de dois substituintes apenas, aceita-se o uso dos prefixos o-, m- e p- (orto, meta e para, respectivamente), ao invés de 1,2-; 1,3- e 1,4-. Dá-se aos substituintes os números mais baixos possíveis. Aplicam-se as regras anteriores para decidir dentre várias possibilidades. Quando os nomes são baseados nos nomes listados na regra 3.2.7., a prioridade é dada aos substituintes já existentes naqueles compostos.

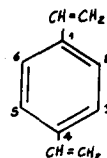
Exemplos:



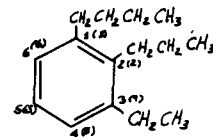
1-etil-4-pentil-benzeno ou p-etil-pentil-benzeno



1,4-di-etil-benzeno ou p-di-etil-benzeno



1,4-divinil-benzeno ou p-divinil-benzeno (porém não p-vinil-estireno)

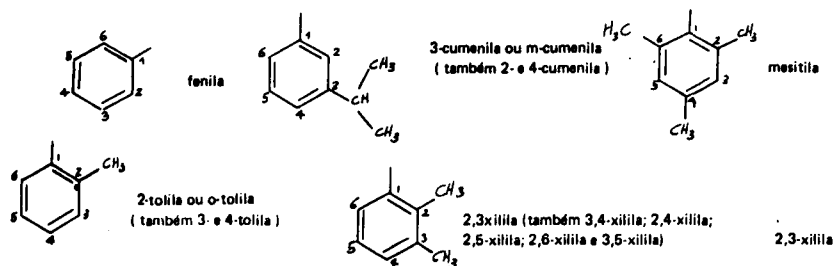


1-butil-3-etil-2-propil-benzeno (ordem alfabética) ou 1-etil-2-propil-3-butil-benzeno (ordem de complexidade)

Observação: O Chemical Abstracts limita o uso dos prefixos orto, meta e para ao caso em que os substituintes são iguais como, por exemplo, em p-di-etil-benzeno. No entanto, quando um dos dois substituintes já está citado no nome principal (por exemplo: isopropila em cumeno) o Chemical Abstracts aceita a utilização limitada dos prefixos (p.ex.: p-etil-estireno).

3.2.10. O nome genérico dos hidrocarbonetos aromáticos mono- e policíclicos é "areno".

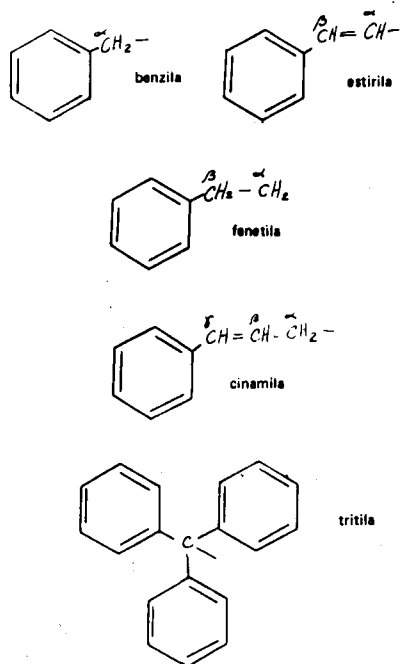
3.2.11. Os radicais univalentes derivados de hidrocarbonetos aromáticos monocíclicos, com a valência livre em um dos átomos do anel, que não são nomeados como derivados de "fenila" tem os nomes listados a seguir. O átomo de carbono com a valência livre recebe o número 1.



* Observe o uso da regra 3.2.8.

3.2.12. Uma vez que foi mantido o nome fenileno (o-, m- ou p-) para o radical bivalente do benzeno, os radicais bivalentes de derivados do benzeno, com as valências livres no anel, são nomeados como derivados do fenileno (o-, m- ou p-, conforme o caso).

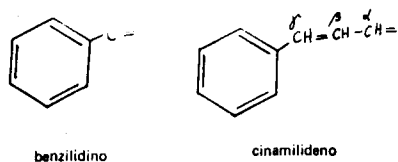
3.2.13. Mantêm-se os seguintes nomes triviais para radicais derivados de hidrocarbonetos monocíclicos aromáticos em que a valência livre está nas cadeias laterais.



Observação: O Chemical Abstracts limita o uso do nome trítila ao radical não substituído em qualquer dos anéis.

3.2.14. Os radicais multivalentes derivados de hidrocarbonetos aromáticos com as valências livres nas cadeias laterais são nomeados de acordo com o disposto na regra 3.1.13.

Exemplos:



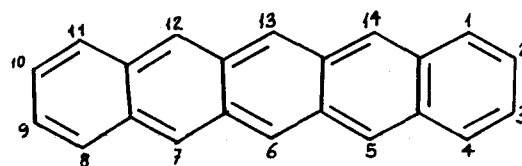
3.2.15. Os nomes genéricos de radicais uni- e bivalentes derivados de hidrocarbonetos aromáticos são "arila" e "arileno", respectivamente.

3.3. Hidrocarbonetos policíclicos com núcleos fundidos

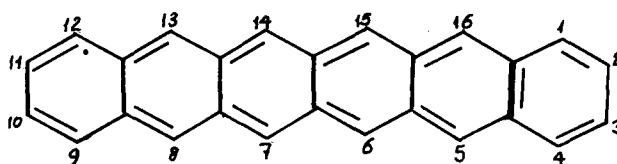
3.3.1. Os nomes de hidrocarbonetos policíclicos com o número máximo possível de duplas ligações "não-cumulativas"* terminam em "eno".

3.3.2. Os nomes dos hidrocarbonetos contendo cinco ou mais anéis benzênicos fundidos em um arranjo linear são formados por prefixos numerais e pela terminação "aceno".

Exemplos:

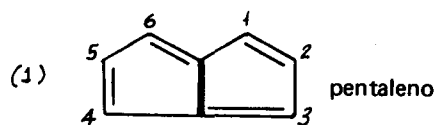


pentaceno

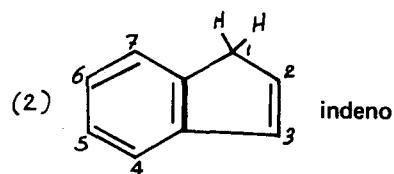


hexaceno

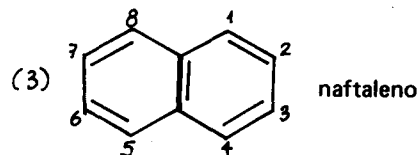
3.3.3. Mantêm-se os nomes dos seguintes hidrocarbonetos policíclicos:



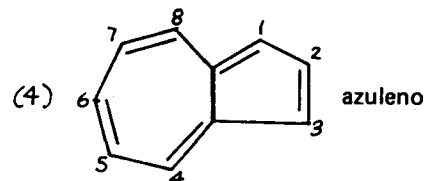
pentaleno



indeno

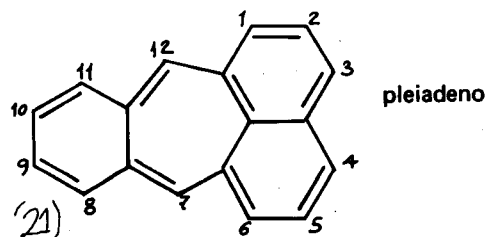
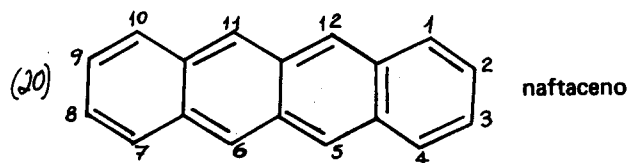
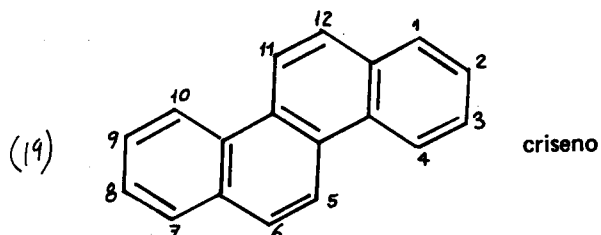
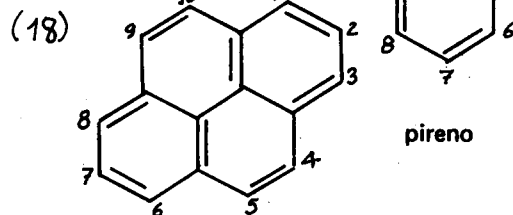
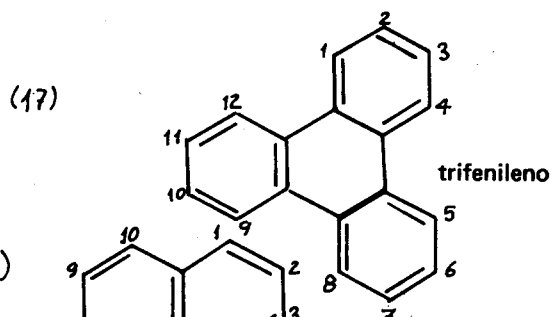
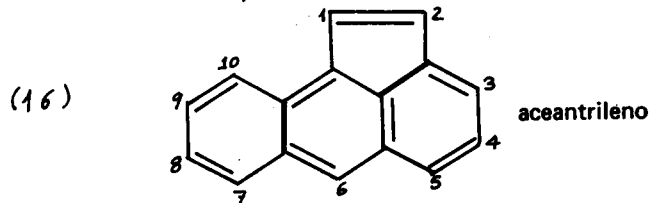
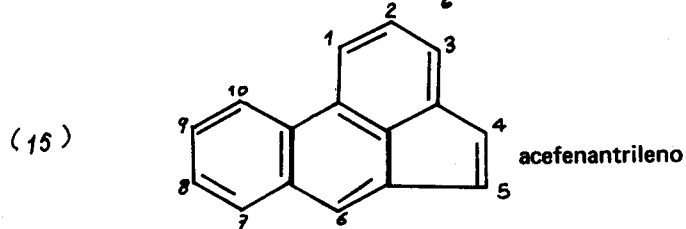
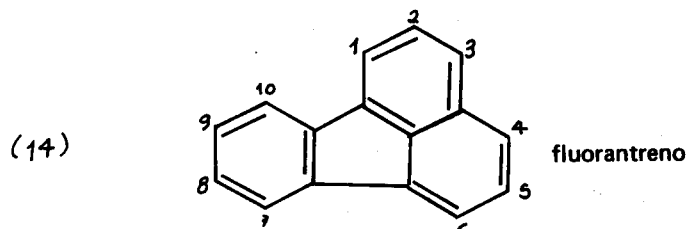
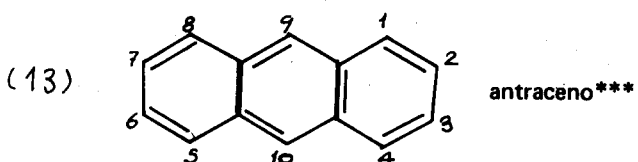
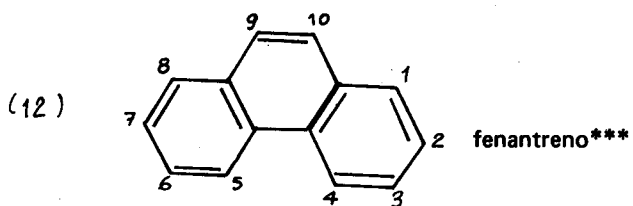
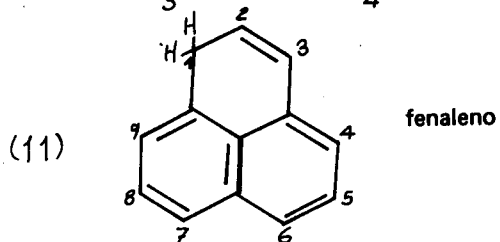
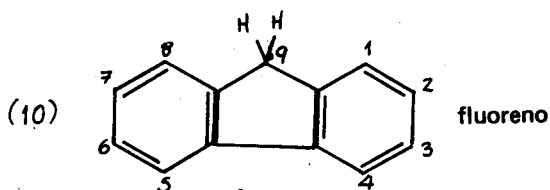
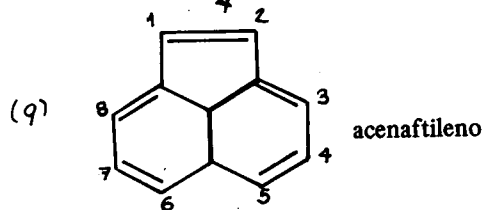
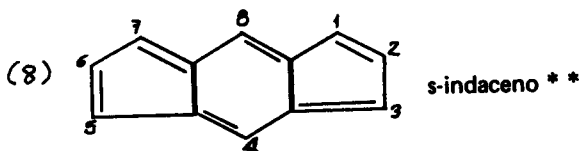
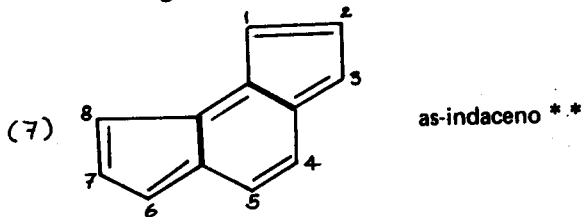
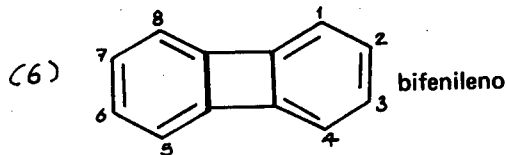
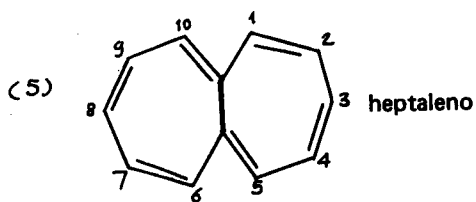


naftaleno



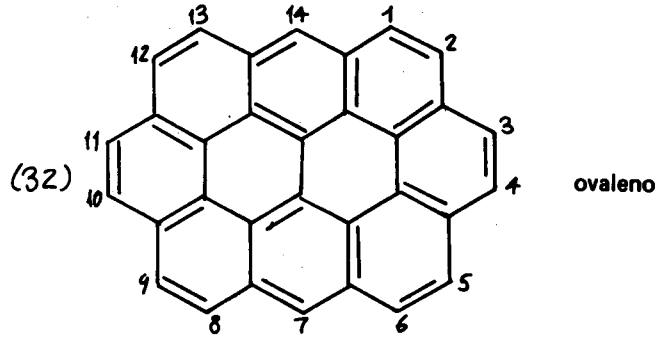
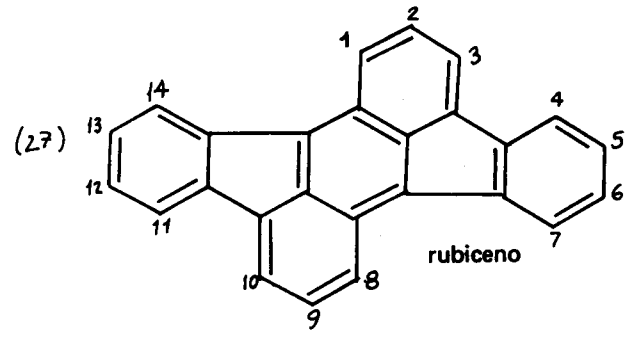
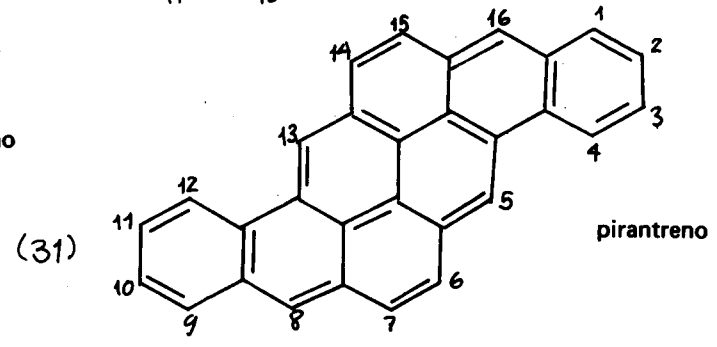
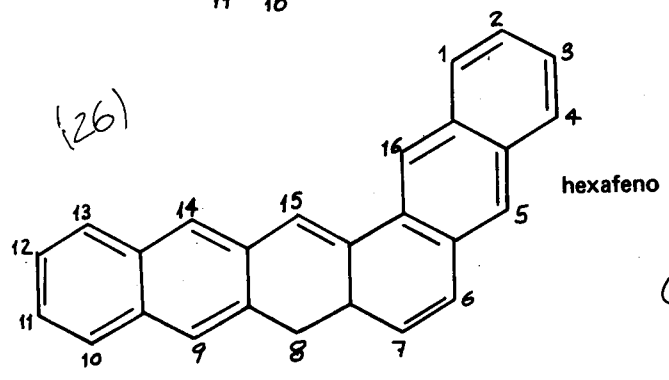
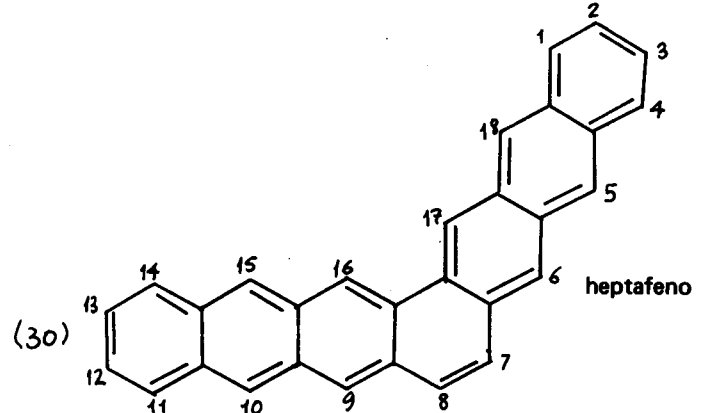
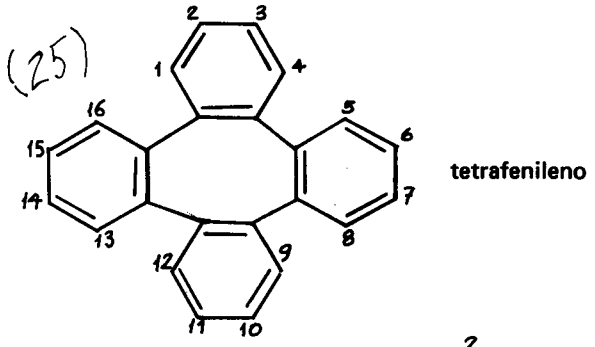
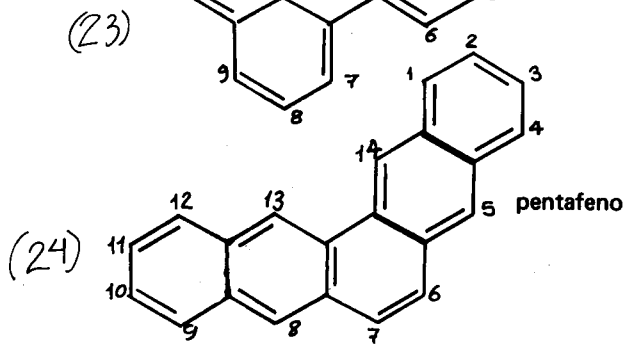
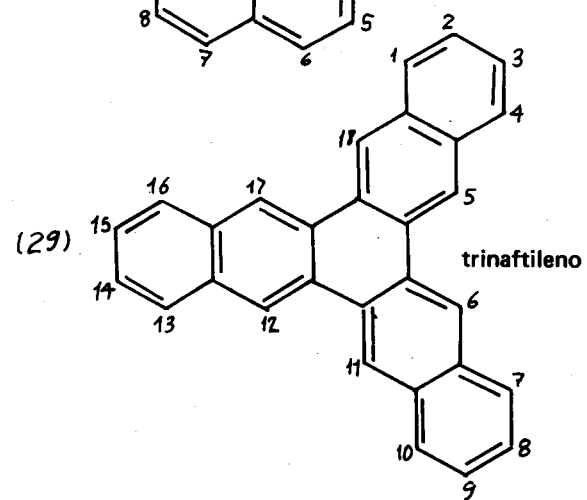
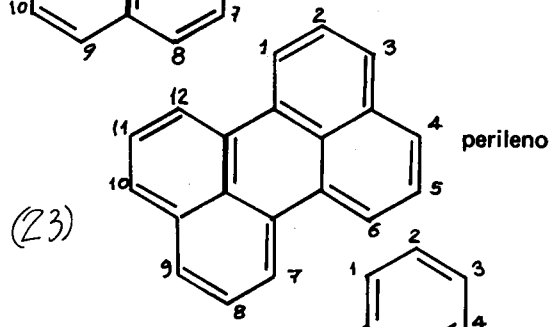
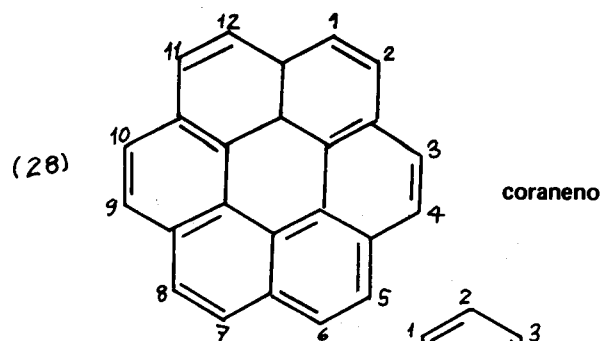
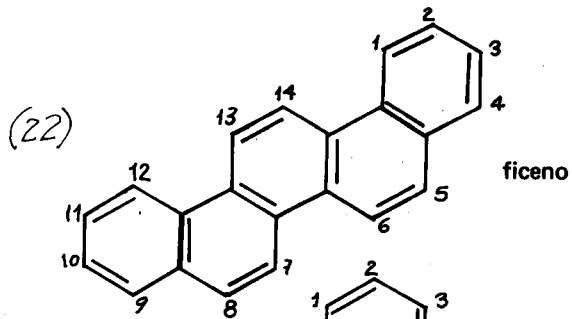
azuleno

* Duplas ligações cumulativas são aquelas em que pelo menos três átomos de carbono, estão ligados por ligações duplas (exemplo: $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$, aleno). As duplas ligações não-cumulativas podem ser alternadas (exemplo: $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$, butadieno, ou aromáticos, como o naftaleno, etc.) ou isoladas.



** "as" - por assimétrico; "s" - por simétrico.

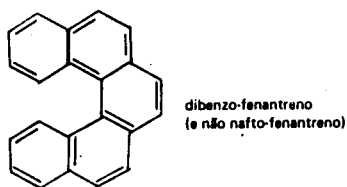
***Exceção à numeração sistemática (regra 3.3.12).



Observação: A partir do Índice de Assuntos do volume 51, o Chemical Abstracts usa bifenileno em lugar de ciclo-butadibenzeno e fenaleno em lugar de benzonafeno. Os hidrocarbonetos policíclicos listados acima devem ser utilizados como nomes principais na nomeação de sistemas "orto-fundidos" ou "orto- e peri-fundidos" para os quais não haja nomes triviais aceitáveis.

3.3.4. Os hidrocarbonetos aromáticos "orto-fundidos"* ou "orto- e peri-fundidos"*** com o número máximo possível de ligações duplas não-cumulativas e que contenham dois ou mais núcleos de cinco ou mais átomos, que não comportem nomes triviais aceitáveis, são nomeados pela adição de nomes apropriados que designem as várias partes da molécula. Uma dessas partes é o composto principal, que deve conter o maior número possível de anéis. Os "componentes adicionados" devem ser os mais simples possíveis e são arranjados como prefixos do nome principal.

Exemplo:



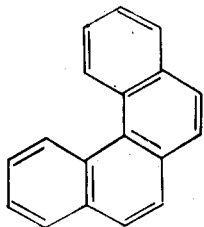
3.3.5. Os prefixos de que fala a regra 3.3.4. são formados pelo nome trivial do hidrocarboneto correspondente (exemplo: pireno, indeno, etc.). Quando mais de um prefixo está presente, eles são arranjados na ordem alfabética. É permitido o uso das seguintes abreviações:

Acenafto	de acenaftileno
Antra	de antraceno
Benzo	de benzeno
Nafto	de naftaleno
Perilo	de perileno
Fenantro	de fenantreno

São ainda utilizados os seguintes prefixos, derivados de hidrocarbonetos monocíclicos (que sempre representam o anel com o número máximo de duplas ligações não-cumulativas): ciclo-penta, ciclo-hepta, ciclo-octa, ciclo-nona, etc.

* Compostos policíclicos nos quais cada par de anéis tem apenas dois átomos em comum são ditas "orto-fundidos".

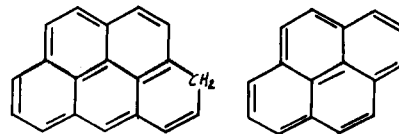
Exemplo:



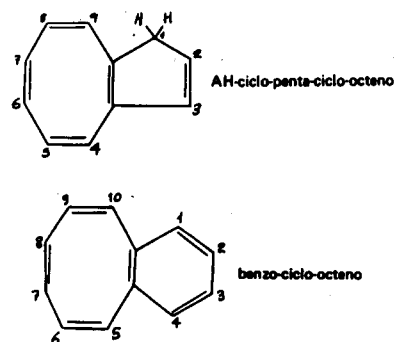
*** O uso da terminação "eno" para representar o número máximo de ligações duplas não-cumulativas em sistemas carbocíclicos dispensa a utilização das terminações "di-eno", "tri-eno", etc., no caso de compostos principais monocíclicos de sete ou mais carbonos. Estados superiores de hidrogenação são indicados pelo uso dos prefixos di-hidro, tri-hidro, etc.

** Compostos policíclicos nos quais um anel tem faces comuns com dois ou mais anéis de uma seqüência de anéis "orto-fundidos" são ditas "orto- e peri-fundidos".

Exemplo:

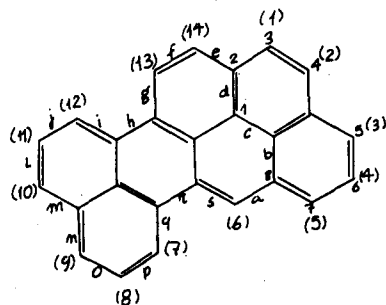
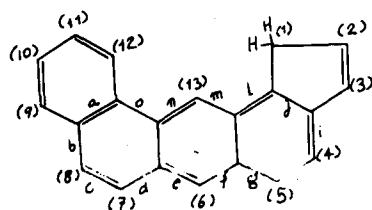
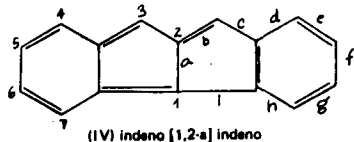
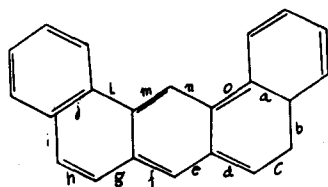
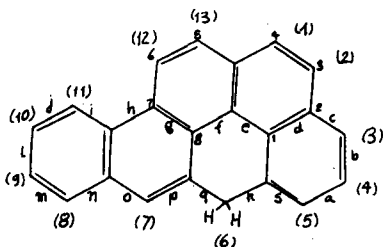
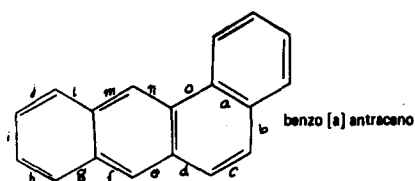


Quando o composto principal é monocíclico, a terminação "eno" significa o número de ligações duplas não-cumulativas e não apenas uma dupla ligação***.



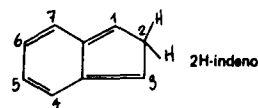
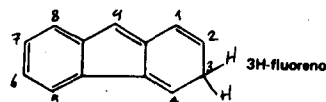
3.3.6. Os diversos isômeros são diferenciados pela adição de letras relacionadas com as diversas faces do composto principal, começando com "a" para o lado "1,2"; "b" para o lado "2,3"; etc. À letra correspondente à face do composto principal onde o substituinte está fundido (que deve estar o mais próximo possível do início do alfabeto) juntam-se, quando necessário, os números correspondentes às posições de fusão do substituinte. Estes números devem ser os menores possíveis, desde que coerentes com a numeração do substituinte. A ordem dos números deve ser compatível com a direção adotada para as letras no composto principal (exemplos II e IV). Quando mais de um prefixo correspondem a posições equivalentes, permitindo uma escolha de letras, utiliza-se a ordem alfabética na nomeação dos prefixos. A localização do primeiro prefixo citado é indicada pela letra mais próxima possível do início do alfabeto (exemplo V). Os números e letras são colocados entre colchetes e situados imediatamente após o prefixo a que correspondem. O sistema completo é então numerado de acordo com as regras 3.3.7. e seguintes, ignorando-se a numeração das partes.

Exemplos:

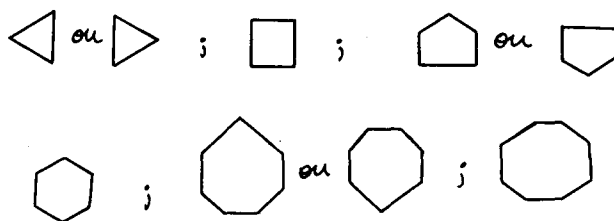


3.3.7. Quando o mesmo nome pode ser aplicado a mais de um sistema de anéis condensados isoméricos com o número máximo de duplas ligações não-cumulativas, pode-se distingui-los modificando o nome com um número correspondente à posição do átomo de hidrogênio, seguido por um H maiúsculo itálico. Estes símbolos geralmente precedem o nome. Os átomos marcados desta maneira são chamados "hidrogênios indicados". O mesmo princípio é aplicado aos radicais e compostos derivados destes sistemas.

Exemplos:

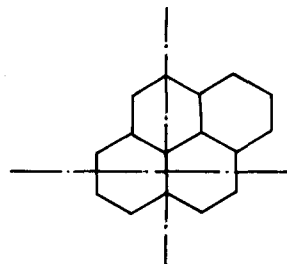


3.3.8. Para fins de numeração os anéis individuais de um hidrocarboneto policíclico "orto-fundido" ou "orto- e peri-fundido" são desenhados como se segue:



O sistema policíclico é orientado de modo a que (a) o maior número de anéis esteja na posição horizontal e (b) o maior número de anéis esteja acima e à direita da linha horizontal (isto é, no primeiro quadrante). Quando mais de uma orientação satisfaz a estas exigências, escolhe-se a orientação que tenha o menor número de anéis no quadrante abaixo e à esquerda da linha horizontal (isto é, no terceiro quadrante).

Exemplos:

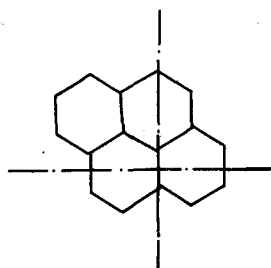


correto

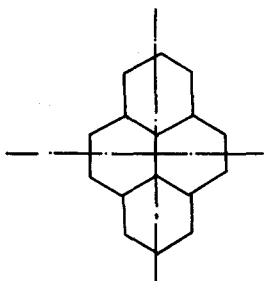
** Os números entre parênteses correspondem à numeração do composto como um todo.

3.3.10. Sempre que for possível a escolha, os átomos de carbono comuns a dois ou mais anéis recebem os menores números possíveis.

Exemplos:

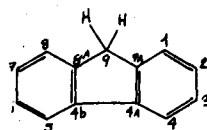


incorreto

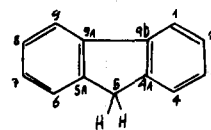


incorreto

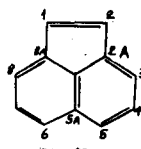
O sistema assim orientado é numerado na direção direta (ponteiros do relógio), começando pelo carbono na posição inversa extrema (contra os ponteiros do relógio) do anel mais alto à direita. Omitem-se os átomos comuns a dois ou mais anéis.



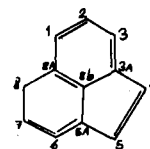
correto



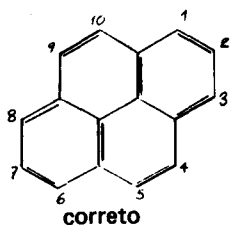
incorreto (4,4,8,9, menor que 4,5,9,9)



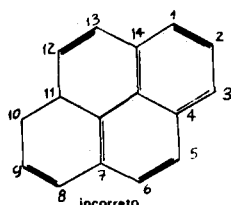
correto



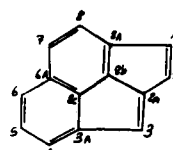
incorreto (2,5,8,8 menor do que 3,5,8,8)



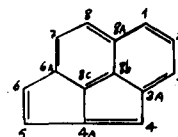
correto



incorreto

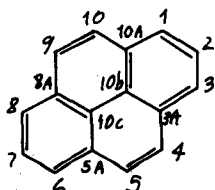


correto

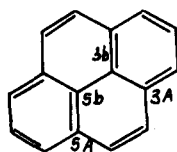


incorreto

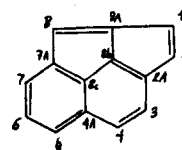
3.3.9. Os átomos comuns a dois ou mais anéis são designados pelas letras "a", "b", "c", "d", etc., adicionadas ao número correspondente à posição imediatamente precedente. Sempre que for possível escolher, os átomos internos tomam o maior número, formando uma seqüência segundo a direção de rotação dos ponteiros do relógio.



correto

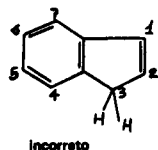
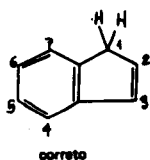


incorreto

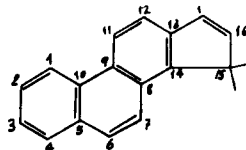
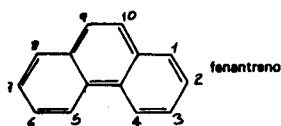
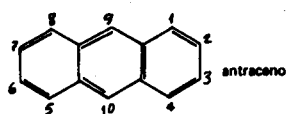


incorreto (2,3,8,8 menor do que 3,4,6,8 ou 2,4,7,8)

3.3.11. Quando houver escolha, os átomos de carbono ligados a hidrogênios indicados recebem os menores números possíveis.



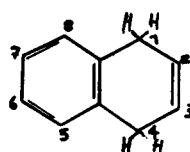
3.3.12. Recomendam-se as seguintes exceções às regras de numeração:



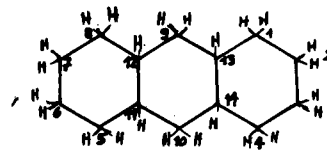
3.3.13. Os nomes de hidrocarbonetos policíclicos "orto-fundidos" e "orto- e peri-fundidos", com número de duplas ligações não-cumulativas inferior ao máximo, são formados pelos prefixos "di-hidro", "tetra-hidro", etc., seguidos pelo nome do hidrocarboneto não reduzido correspondente. O prefixo "per-hidro" significa hidrogenação completa. Se for possível uma escolha para a numeração dos hidrogênios indicados, estes recebem os menores números possíveis.

* Ver também regras de nomenclatura de esteróides.
 ** Exceção à numeração sistemática.

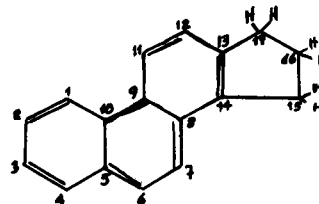
Exemplos:



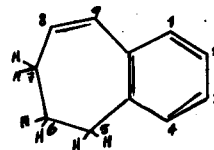
1,4-di-hidro-naftaleno



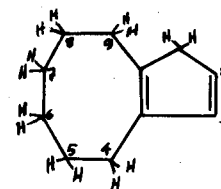
per-hidro-antraceno



16,17-di-hidro-15H-ciclo-penta [a] fenantreno **

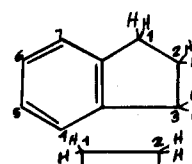


6,7-di-hidro-5H-benzo-ciclo-hepteno

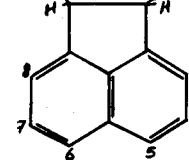


4,5,6,7,8,9-hexa-hidro-1H-ciclo-penta-ciclo-octeno

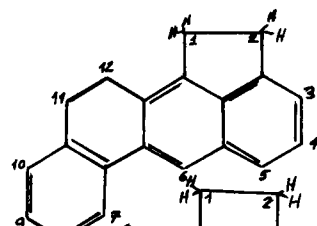
Os seguintes nomes são mantidos:



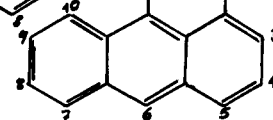
indano



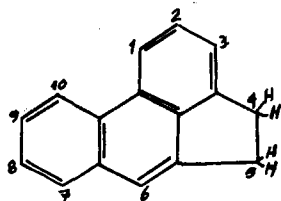
acenafteno



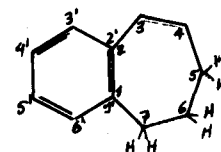
colatreno



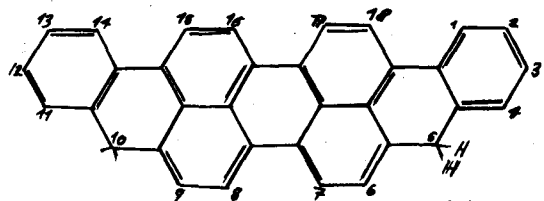
aceantreno



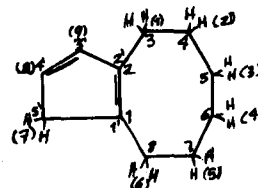
acefenantreno



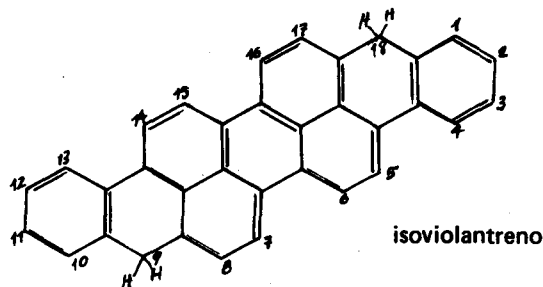
1,2-benzo-1,3-ciclo-heptadieno**



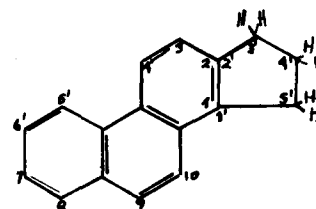
violantreno



1,2-ciclo-penta-1',3'-dieno-ciclo-octeno



isoviolantreno

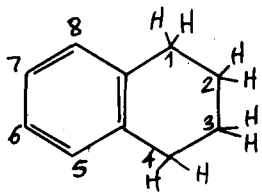


1,2-ciclo-penteno-fenantreno

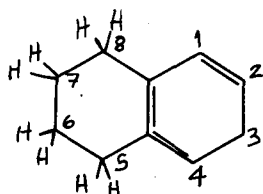
O Chemical Abstracts utiliza esta regra de preferência à regra alternativa 3.3.16.

3.3.14. Quando houver escolha, os átomos de carbono que têm mais de um hidrogênio nos sistemas hidrocarbônicos policíclicos recebem os menores números possíveis.

Exemplo:



correto

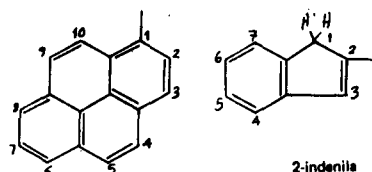


incorreto

3.3.15. Os hidrocarbonetos policíclicos substituídos são nomeados de acordo com os mesmos princípios aplicados à nomenclatura dos hidrocarbonetos monocíclicos substituídos.

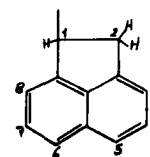
3.3.16.* Os nomes de hidrocarbonetos policíclicos "orto-fundidos" que tenham, (a) menos do que o número máximo de duplas ligações não-cumulativas, (b) pelo menos uma unidade terminal que seja mais conveniente nomeada como um derivado insaturado de ciclo-alcano ou (c) uma ligação dupla entre átomos de carbono nas posições de fusão de anéis, podem ser obtidos pela adição do nome da unidade terminal ao nome do outro componente. Podem ser usadas as abreviações da regra 3.3.5. e as exceções da regra 3.3.13.

Exemplos:



1-pirenila

2-indenila

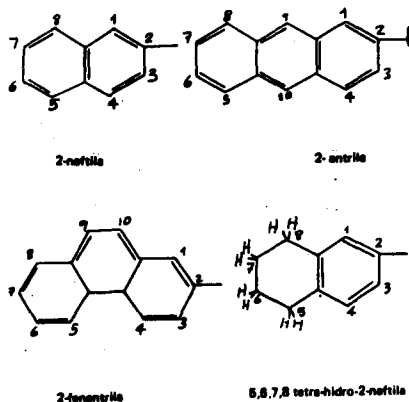


1-acenafilla

*Alternativa, em parte, para a regra 3.3.13.

** Os números entre parênteses correspondem à numeração do composto como um todo.

Constituem exceção à regra:

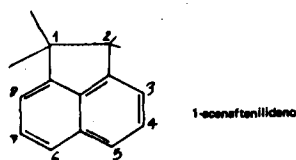


Observação: As exceções acima limitam-se aos sistemas mencionados. Os radicais provenientes de derivados destes sistemas seguem a regra geral.

Exemplo: benzo [a] antracênila (e não benzo [a] antrila)

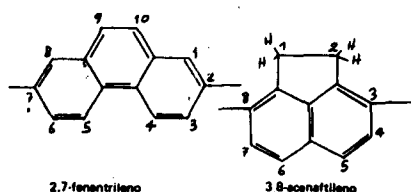
3.3.19. Os radicais bivalentes derivados de hidrocarbonetos policíclicos que tenham as duas valências livres no mesmo átomo de carbono são nomeados pela substituição da terminação "eno" do hidrocarboneto por "enilideno".

Exemplo:



3.3.20. Os radicais bivalentes derivados de hidrocarbonetos policíclicos que tenham as duas valências livres em átomos de carbono diferentes são nomeados pela substituição da terminação "eno" do hidrocarboneto por "ileno".

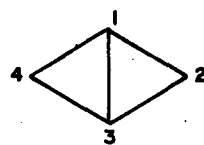
Exemplos:



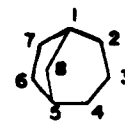
3.4. Hidrocarbonetos em Ponte – Sistema de Von Bayer

3.4.1. Os hidrocarbonetos alicíclicos saturados consistindo de apenas dois anéis com dois ou mais átomos de carbono em comum, tomam o nome do hidrocarboneto acíclico linear de mesmo número de carbonos precedido pelo prefixo "biciclo". Os números de átomos de carbono em cada uma das três pontes* que se ligam aos dois carbonos terciários são indicados entre colchetes na ordem decrescente e separados por pontos. O anel formado pelas duas maiores pontes é chamado "anel principal".

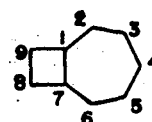
Exemplos:



biciclo [1.1.0]butano



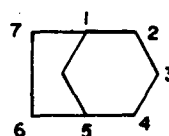
biciclo [3.2.1]octano



biciclo [5.2.0]nonano

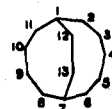
3.4.2. Os hidrocarbonetos bicíclicos saturados são numerados a partir de uma das cabeças de ponte, seguindo a maior ponte até a outra cabeça de ponte. A numeração, é então, continuada até a primeira cabeça de ponte através da maior cadeia não numerada e depois completada pelo caminho mais curto.

Exemplos:



biciclo [3.2.1]octano

Observação: caminho mais longo: 1,2,3,4,5
caminho mais longo a seguir: 5,6,7,1
caminho mais curto: 1,8,5

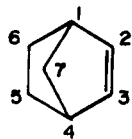


biciclo [5.4.2]tridecano

3.4.3. As insaturações em sistemas policíclicos são tratadas como no caso dos hidrocarbonetos acíclicos. Quando, entretanto, a escolha for possível, dá-se os menores números à ponte contendo a insaturação.

Exemplo:

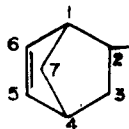
* Chama-se "ponte" a cadeia de átomos que liga dois diferentes pontos de um sistema alicíclico bi- ou policíclico. Os dois carbonos terciários comuns à várias pontes são chamados "cabeças de ponte".



biciclo[2.2.1]-2-hepteno*

3.4.4. Os radicais derivados destes hidrocarbonetos seguem as normas estabelecidas para os radicais provenientes de hidrocarbonetos acíclicos. A numeração do hidrocarboneto, entretanto, é mantida. O carbono com a valência livre recebe o menor número possível, desde que coerente com a numeração do hidrocarboneto.

Exemplo:



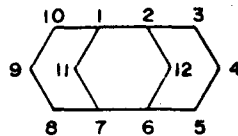
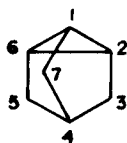
biciclo[2.2.1]-5-hepteno-2-ila (e não biciclo[2.2.1]-2-hepteno-6-ila)**

3.4.5. Os hidrocarbonetos em ponte com mais de dois anéis são nomeados segundo os princípios das regras 3.4.1. a 3.4.4. O prefixo "biciclo" é substituído por "triciclo", "tetraciclo", "pentaciclo", etc., conforme apropriado.

3.4.6. O número de anéis de um sistema policíclico é igual ao número de quebras de cadeias necessário para transformá-lo em um sistema acíclico.

3.4.7. O prefixo indicativo do número de ciclos é seguido por um par de colchetes contendo, na ordem decrescente, números indicando o número de átomos de carbono nas duas cadeias do anel principal, a ponte principal e as pontes secundárias***.

Exemplo:



tricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptano

tricyclo[5.3.1.1^{2,6}]dodecano

3.4.8. O anel principal forma com a ponte principal um sistema bicíclico, cuja numeração é feita segundo a regra 3.4.2.

3.4.9. A localização das demais pontes, ou pontes secundárias, é dada por superescritos nos números indicativos do número de carbonos das pontes.

3.4.10. Para fins de numeração, as pontes secundárias são consideradas na ordem decrescente do número de átomos de carbono. A numeração das pontes é feita em seqüência à numeração do anel principal e da ponte principal a partir da cabeça de ponte de número mais elevado.

* Também chamado 2-norborneno. Ver regras para terpenos, adiante.

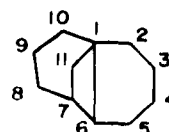
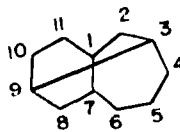
** Chemical Abstracts listaria o radical do exemplo como 5-norborneno-2-ila.

*** Para a localização e numeração das pontes secundárias veja as regras 3.4.9; 3.4.10. e 3.4.11.

3.4.11. Quando uma escolha é possível, aplicam-se sucessivamente os seguintes critérios na escolha da ponte principal:

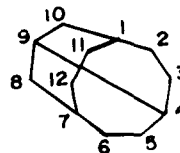
a. O anel principal deve conter o maior número possível de carbonos, dois dos quais devem servir de cabeças da ponte principal.

Exemplos:



tricyclo[5.4.0.0^{3,9}]undecano

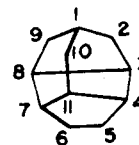
tricyclo[5.3.1.0^{1,6}]undecano



tricyclo[5.3.2.0^{4,9}]dodecano (e não tricyclo[5.2.3.0]dodecano)

b. A ponte principal deve ser a maior possível.

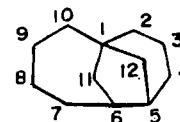
Exemplo:



tetracyclo[5.2.2.0^{3,8}.0^{4,11}]undecano

c. O anel principal deve ser dividido tão simetricamente quanto possível pela cadeia principal.

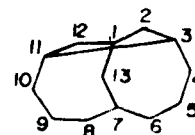
Exemplo:



tricyclo[4.4.1.1^{1,5}]dodecano (e não tricyclo[5.3.1.1^{1,6}]dodecano)

d. Os números superescritos que localizam as pontes secundárias devem ser os menores possíveis.

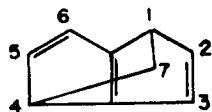
Exemplo:



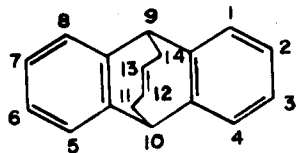
tricyclo[5.5.1.0^{3,11}]tridecano (e não tricyclo[5.5.1.0^{5,9}]tridecano)

3.4.12.* Os hidrocarbonetos policíclicos que possam ser classificados como "orto-fundidos" ou "orto- e peri-fundidos" de acordo com a regra 3.3.4., e que, ao mesmo tempo, tenham outras pontes, são primeiramente nomeados como sistemas "orto-fundidos" ou "orto- e peri-fundidos". As demais pontes são indicadas por prefixos derivados dos hidrocarbonetos correspondentes, mantendo-se as terminações "ano", "eno", etc. As posições das pontes são indicadas pelos números das cabeças de ponte. Quando várias pontes estão presentes, aplica-se a ordem alfabética.

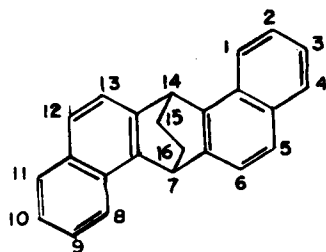
Exemplos:



1,4-di-hidro-1,4-metano-pentaleno

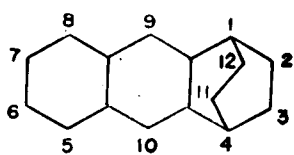


9,10-di-hidro-9,
10-(2-trans-buteno)-antraceno

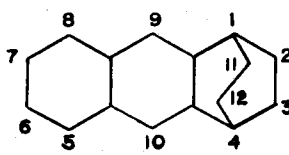


7,14-di-hidro-7,14
-etano-dibenzo [a,h] antraceno

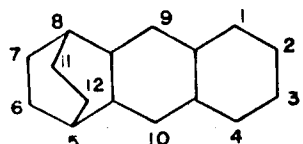
3.4.13. O sistema "orto-fundido" ou "orto- e peri-fundidos" é numerado segundo as regras próprias. Quando é possível uma escolha, dá-se às cabeças de ponte os menores números possíveis. As pontes são, então, numeradas começando pelo átomo de carbono mais próximo da cabeça de ponte com o maior número.



(numeração correta)



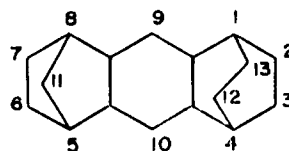
(numeração incorreta)



(numeração incorreta)

per-hidro-1,2-etano-antraceno

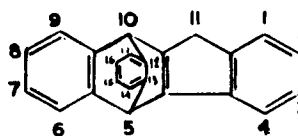
3.4.14. Quando é possível a escolha, os números menores são atribuídos às cabeças das diversas pontes na ordem alfabética de sua citação no nome. Os átomos das pontes são numerados de acordo com a regra 3.4.13.



per-hidro-1,4-etano-5,8-metano-antraceno **

3.4.15. Quando a ponte é formada por um radical bivalente derivado de um hidrocarboneto cíclico, os menores números são dados aos átomos de carbono da ponte mais curta possível. A numeração continua, então, através do anel.

Exemplo:

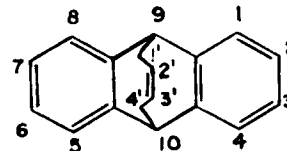


10,11-di-hidro-5,10-o-benzeno-5H-benzo [b] fluoreno

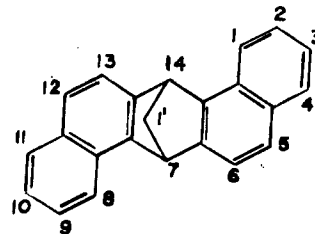
3.4.16.*** Os hidrocarbonetos policíclicos que possam ser classificados como "orto-fundidos" ou "orto e peri-fundidos" e que tenham outras pontes podem ser nomeados como sistemas "orto-fundidos" ou "orto- e peri-fundidos" substituídos com radicais bivalentes.

3.4.17.*** A numeração das pontes é independente da numeração do resto da molécula e começa no carbono vizinho à cabeça de ponte que tem o menor número de locação. Os números correspondentes à numeração das pontes são primados.

Exemplos:



9,10-di-hidro-9,10-(2'-cis-butileno)-antraceno



7,14-di-hidro-7,14-metileno-dibenzo [a,h] antraceno

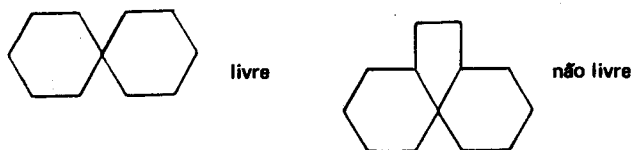
* O Chemical Abstracts aplica as regras 3.4.12. e 3.4.15. e não as alternativas 3.4.16. e 3.4.17.

** O carbono da ponte vizinho ao átomo numerado 5, que é a cabeça de ponte com o maior número, recebe o número 11. Só então a outra cadeia é numerada.

*** Alternativa para as regras 3.4.12. e 3.4.15.

3.5. Espiranos

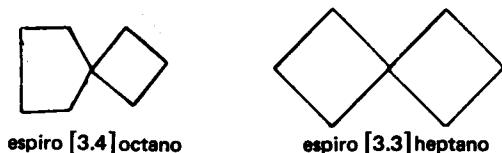
Um espirano é um hidrocarboneto formado por anéis ligados entre si por um único átomo de carbono comum a ambos os anéis. A ligação espiro é dita livre se o átomo comum é o único contato entre os dois anéis.



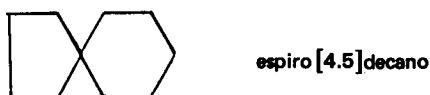
O átomo comum é chamado espiro-átomo. De acordo com o número de espiro-átomos, os compostos são ditos mono-espiranos, diespiranos, triespiranos, etc. As regras seguintes aplicam-se aos compostos que contenham ligações espiro livres.

3.5.1.* Os mono-espiranos de dois anéis alicíclicos são nomeados colocando-se o prefixo “espiro” antes do nome do hidrocarboneto alicíclico normal que tem o mesmo número de carbonos. O número de átomos de carbono ligados ao espiro-átomo em cada anel é indicado na ordem crescente, entre colchetes. O par de colchetes é colocado entre o prefixo e o nome do hidrocarboneto.

Exemplos:

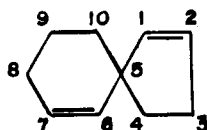


3.5.2.* Os átomos de carbono nos mono-espiranos são numerados consecutivamente, a partir de um dos átomos do menor anel, vizinho do espiro-átomo primeiramente através do menor anel, depois o espiro-átomo e o maior anel.



3.5.3.** Quando um ou ambos os anéis de um mono-espirano contêm insaturações, estas devem receber os menores números possíveis, respeitada a regra 3.5.2. As duplas ligações tem precedência sobre as triplas para fins de numeração.

Exemplo:



espiro [4.5]deca-1,6-dieno

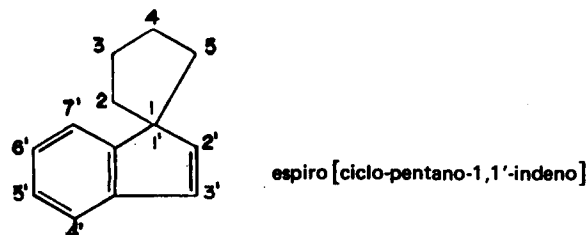
3.5.4. Quando um ou ambos os anéis componentes de um mono-espirano são policíclicos fundidos, coloca-se o

* Alternativas para a regra 3.5.8.

** Alternativa para a regra 3.5.9.

prefixo “espiro” antes dos nomes dos componentes, arranjados em ordem alfabética e colocados entre colchetes. Mantêm-se a numeração individual de cada componente. Dá-se o menor número possível ao espiro-átomo e marca-se os números do segundo componente com primos. A posição do espiro-átomo é indicada por números apropriados colocados entre os nomes dos dois componentes.

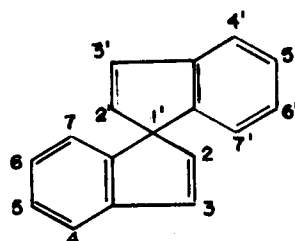
Exemplo:



espiro [ciclo-pentano-1,1'-indeno]

3.5.5.*** Os mono-espiranos que contêm dois componentes policíclicos idênticos são nomeados colocando-se o prefixo “espiro-bi” antes do nome do sistema policíclico. Mantêm-se a numeração individual dos componentes e os números correspondentes são primados. A posição do espiro-átomo é indicada por números apropriados, colocados, antes do nome do mono-espirano.

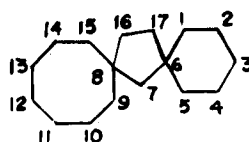
Exemplo:



1,1'-espiro-biindeno

3.5.6.**** Os poliespiranos que contêm três ou mais anéis alicíclicos são nomeados pela colocação dos prefixos “diespiro”, “triespiro”, etc., antes do nome do hidrocarboneto acíclico normal com o mesmo número de átomos de carbono. O número de átomos de carbono ligados aos espiro-átomos em cada anel é colocado entre colchetes, sucessivamente, na ordem crescente da numeração dos átomos de carbono do composto. A numeração dos átomos de carbono do poliespirano inicia-se pelo átomo vizinho a um dos espiro-átomos terminais de tal modo que os espiro-átomos recebem os menores números possíveis.

Exemplo:



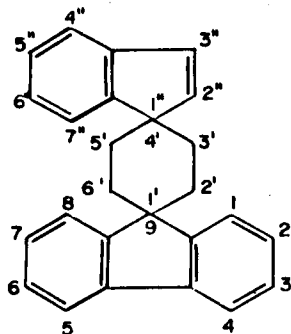
diespiro [5.1.7.2]heptadecano

*** Alternativa para a regra 3.5.10.

**** Alternativa para a regra 3.5.11.

3.5.7. Os poliespiranos que contêm pelo menos um componente policíclico fundido são nomeados de acordo com a regra 3.5.4., substituindo-se o prefixo "espiro" por "diespiro", "triespiro", etc., e colocando-se os componentes terminais na ordem alfabética.

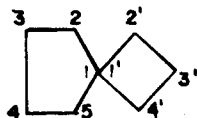
Exemplo:



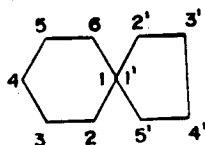
diespiro [fluoreno-9,1'-ciclo-hexano-4',1''-indeno]

3.5.8.** Nomeiam-se os monoespiranos em que os dois componentes são diferentes colocando-se a palavra "espiro" entre os nomes dos dois componentes. O maior componente tem preferência na ordem de citação. Entre a palavra "espiro" e o nome de cada componente colocam-se números apropriados para a localização do espiro-átomo. A numeração de cada componente é feita individualmente, de modo a que o espiro-átomo receba os menores números possíveis. Os números do menor componente são primados. Pode-se omitir, eventualmente, o número 1, se a numeração é de livre escolha para um dos componentes.

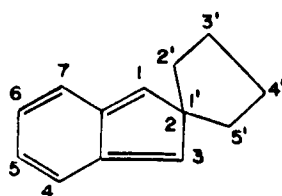
Exemplos:



ciclo-pentano-espiro-ciclo-butano (ou ciclo-pentano-1-espiro-1'-ciclo-butano)



ciclo-hexano-espiro-ciclo-pentano

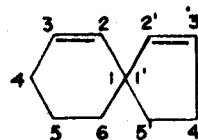


2H-indeno-2-espiro-1'-ciclo-pentano

3.5.9.*** Quando se aplica a regra 3.5.8. como alternativa às regras 3.5.1. e 3.5.2., aplicam-se os princípios de numeração da regra 3.5.3., porém o espiro-átomo tem precedência sobre as insaturações e recebe os números mais baixos. O segundo componente é colocado entre parênteses.

Exemplos:

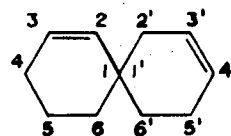
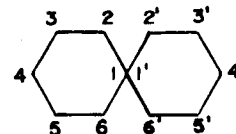
2-ciclo-hexeno-espiro-(2'-ciclo-penteno)
(ou 2-ciclo-hexeno-1-espiro-1'-(2'-ciclo-penteno))



3.5.10.* Aplica-se a regra 3.5.5., igualmente, quando há dois componentes monocíclicos com idêntica saturação, porém, dá-se sempre ao espiro-átomo o número 1 (regra 3.5.9.).

Exemplos:

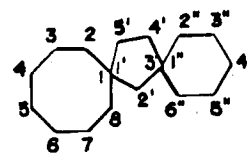
espiro-biciclo-hexano



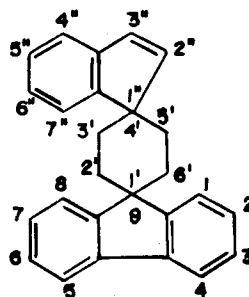
2-ciclo-hexeno-espiro-(3'-ciclo-hexeno)

3.5.11.** Os poliespiranos são nomeados de acordo com a regra 3.5.8. A seqüência de indicação dos componentes terminais segue, entretanto, a ordem de complexidade. A ordem de complexidade é estabelecida pelas normas seguintes: (a) um sistema policíclico é mais complexo do que um monocíclico; (b) entre dois sistemas policíclicos, o mais complexo é o que contém o maior número de anéis; (c) se os sistemas policíclicos contêm o mesmo número de anéis, o mais complexo é o que contém o maior anel; (d) se os sistemas policíclicos contêm o mesmo número de anéis de tamanhos idênticos, tem precedência a ordem alfabética dos nomes. O primeiro nome citado é o mais complexo. A numeração dos compostos individuais segue as regras 3.5.8. e 3.5.9.

Exemplos:



ciclo-octano-espiro-ciclo-pentano-3'-espiro-ciclo-hexano



fluoreno-9-espiro-1'-ciclo-hexano-4'-espiro-1''-indeno

* Os componentes terminais do exemplo são fluoreno e indeno. O uso da ordem alfabética determina a posição dos terminais no nome e, em consequência, a ordem em que os anéis não terminais devem ser apresentados.

** Alternativa a 3.5.1. e 3.5.2.

*** Alternativa para as regras 3.5.3.

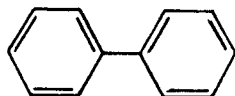
* Alternativa para a regra 3.5.5.

** Alternativa para as regras 3.5.6. e 3.5.7.

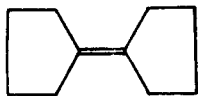
3.6. Conjuntos de anéis

3.6.1. Dois ou mais sistemas cíclicos que estão diretamente ligados por ligações duplas ou simples são chamados "conjunto de anéis" quando o número de ligações comuns é um a menos do que o número de sistemas cíclicos envolvidos.

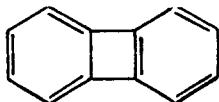
Exemplos:



Conjunto de anéis



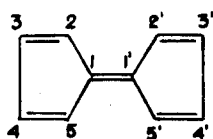
conjunto de anéis



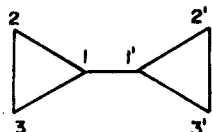
sistema policíclico fundido

3.6.2. Os conjuntos de anéis formados por dois sistemas cíclicos idênticos podem ser nomeados de duas maneiras: (a) pela colocação do prefixo "bi" antes do nome do radical correspondente ou (b) no caso de uma ligação simples comum, colocando o prefixo "bi" antes do nome do hidrocarboneto correspondente. Os anéis são numerados independentemente de modo a dar os menores números possíveis aos átomos de ligação, e um dos anéis recebe números primados. Os átomos de ligação são indicados por números apropriados colocados antes do nome do composto.

Exemplos:



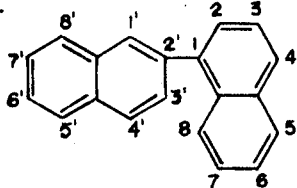
1,1'-biciclo-pentadienilideno



1,1'-biciclo-propila ou
1,1'-biciclo-propano

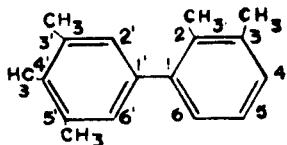
3.6.3. Se uma escolha na numeração é possível, os números primados são atribuídos ao sistema que tenha o átomo de ligação de maior número.

Exemplo:

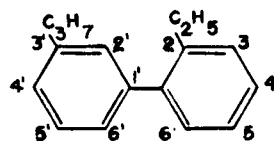


1,2'-binaftila ou
1,2'-binaftaleno

3.6.4. Se o conjunto é formado por dois sistemas cíclicos idênticos que têm substituintes em posições diferentes, estes são citados antes do nome do conjunto principal, na ordem alfabética. A localização de cada grupo substituinte é feita de acordo com as regras 3.6.2. e 3.6.3., porém os números primados são considerados maiores do que os números não primados. Os números assim obtidos são colocados na ordem crescente, independentemente de serem primados ou não. Exemplos:



2,3,3',4',5'-pentametil-bifenila
e não 2',3,3',4',5-pentametil-bifenila



2-etil-3'-propil-bifenila (e não
2'-etil-3-propil-bifenila)

3.6.5. O nome "bifenila" é reservado ao conjunto formado por dois anéis benzênicos.

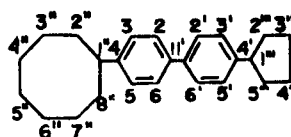
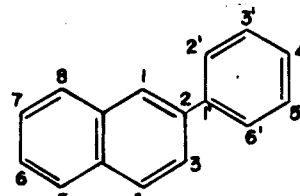
3.6.6. Outros conjuntos de anéis são nomeados escolhendo-se um dos componentes como base e considerando-se os demais componentes como substituintes. Os substituintes são, então, indicados no nome do conjunto na ordem alfabética. O componente básico recebe os números não primados. Os substituintes recebem primos, duplos-primos, etc., na ordem alfabética de citação. Os átomos de ligação são citados antes de cada substituinte, quando necessário*.

3.6.7. O componente básico é escolhido considerando-se sucessivamente, as seguintes normas, até que uma decisão seja possível:

(i) O sistema cíclico contendo o maior número de anéis**.

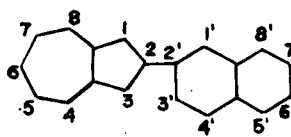
Exemplos:

2-fenil-naftaleno

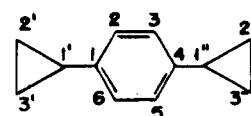


4-ciclo-octil-4'-ciclo-pentil-bifenila

(ii) O sistema contendo o maior anel.



2-(2'-naftil)-azuleno

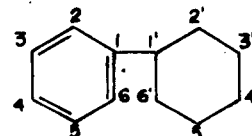


1,4-diciclo-propil-benzeno ou
p-diciclo-propil-benzeno

(iii) O sistema no mais baixo estado de hidrogenação.

Exemplo:

ciclo-hexil-benzeno

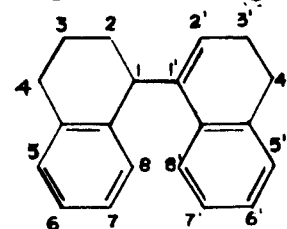


(iv) A ordem de sistemas estabelecida na lista da regra 3.3.3.

3.6.8. Os sistemas de que trata a regra 3.6.7. (iii) podem ser também nomeados como produtos de hidrogenação (regra 3.3.13).

Exemplos:

1,2,3,3',4,4'-hexa-hidro-
-1,1'-binaftila



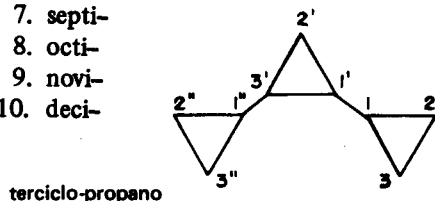
* Chemical Abstracts não usa os números primos neste caso.

**Conjuntos de anéis podem ser usados como base, como no caso do segundo exemplo.

3.6.9. Conjuntos de anéis não ramificados, formados por três ou mais de três sistemas anulares idênticos, são nomeados colocando-se um prefixo numérico conveniente antes do nome do hidrocarboneto correspondente ao sistema anular que se repete. Os seguintes prefixos são utilizados:

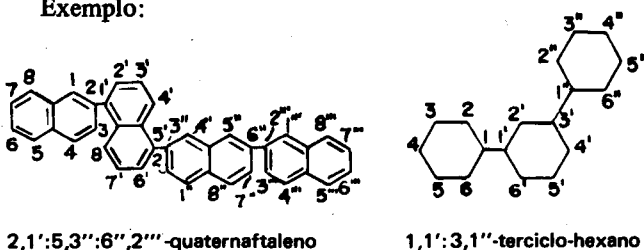
- | | |
|-------------|-----------|
| 3. ter- | 7. septi- |
| 4. quater- | 8. octi- |
| 5. quinque- | 9. novi- |
| 6. sexi- | 10. deci- |

Exemplo:



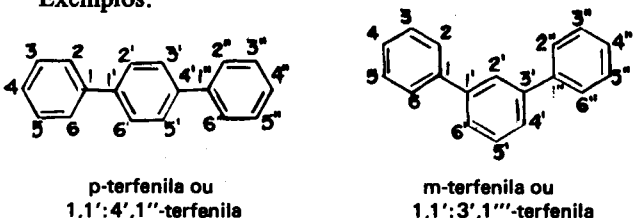
3.6.10. Os números não primados são reservados a um dos sistemas terminais. Os demais sistemas são numerados a seguir, na seqüência que atribuir aos átomos de ligação os menores números possíveis. Os números indicativos de cada par de átomo de ligação são separados por um duplo ponto.

Exemplo:



3.6.11. Conjuntos de anéis com mais de dois anéis benzênicos não substituídos são nomeados antepondo-se os prefixos da regra 3.6.9. à palavra "fenila".

Exemplos:



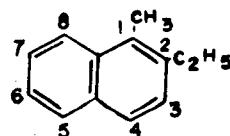
3.7. Hidrocarbonetos cíclicos com cadeias laterais

Hidrocarbonetos cíclicos complexos, com cadeias laterais alifáticas, podem ser nomeados de acordo com um dos métodos dados a seguir. A escolha deve ser feita de modo a garantir o nome mais simples possível ou o mais apropriado quimicamente.

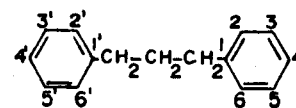
3.7.1. Quando não existir um nome trivial aceito geralmente para o hidrocarboneto então (a) o nome do radical correspondente à cadeia lateral alifática é anteposto ao nome do hidrocarboneto cíclico ou (b) o nome do radical correspondente ao hidrocarboneto cíclico é anteposto ao nome do hidrocarboneto alifático correspondente à cadeia lateral. A escolha é feita de modo a que se tenha o número máximo de substituições em uma única estrutura e que esta estrutura seja a maior possível.

3.7.2. Os hidrocarbonetos que contêm várias cadeias ligadas a um sistema cíclico são geralmente nomeados como derivados do hidrocarboneto cíclico. Os compostos que têm várias cadeias laterais ou radicais cíclicos ligados a uma única cadeia são nomeados como derivados do composto acíclico.

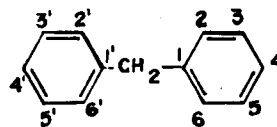
Exemplos:



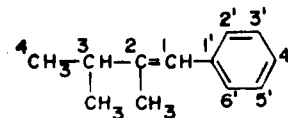
2-etil-metil-naftaleno



1,3-difenil-propano



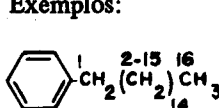
difenil-metano



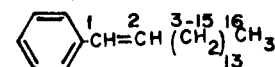
2,3-dimetil-1-fenil-1-buteno

3.7.3. Os hidrocarbonetos que contêm um sistema cíclico relativamente simples ligado a uma cadeia longa são geralmente nomeados como derivados do hidrocarboneto acíclico. Quando a parte acíclica tem um número relativamente pequeno de carbonos e a parte cíclica é policíclica, geralmente o hidrocarboneto é nomeado como derivado do hidrocarboneto cíclico.

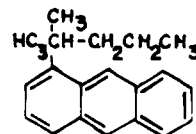
Exemplos:



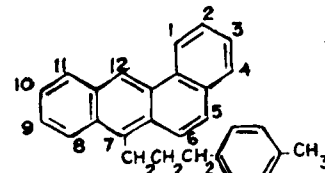
1-fenil-hexadecano



1-fenil-1-hexadeceno



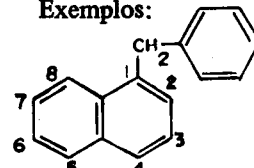
8-(1,1-dimetil-butil)-antraceno



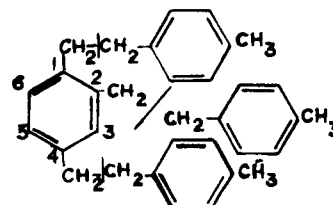
7-(3-fenil-propil)-benzo [a] antraceno

3.7.4. Os nomes vulgares reconhecidos para radicais complexos podem ser utilizados se levam à simplificações da nomenclatura.

Exemplos:



1-benzil-naftaleno

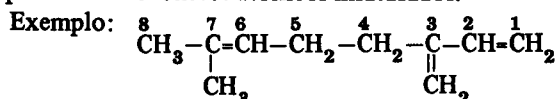


1,2,4-tris-(2-p-tolil-propil)-benzeno

3.8. Hidrocarbonetos terpênicos

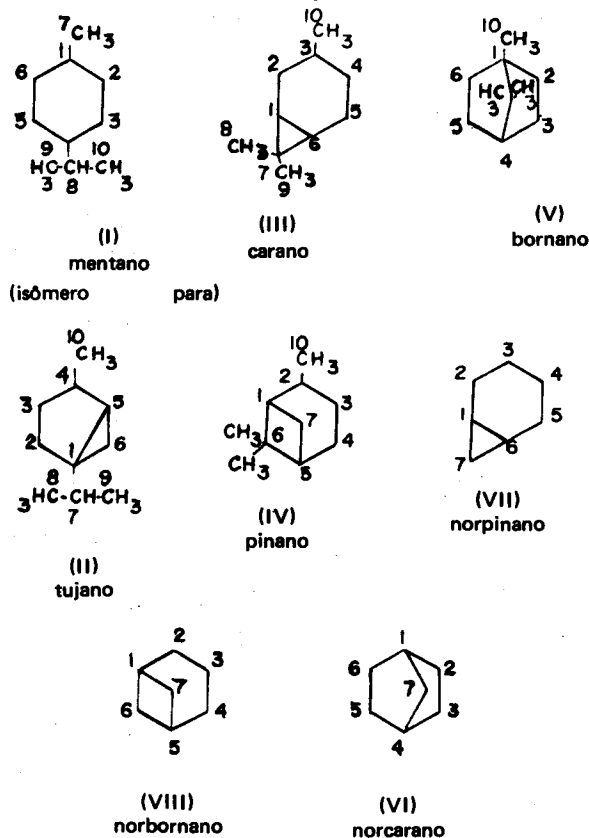
Para atender a um hábito de longo tempo na nomenclatura química, aos terpenos é dado tratamento excepcional, aplicando-se regras especiais. Neste trabalho apenas as regras fundamentais são mencionadas. Para uma discussão mais detalhada da nomenclatura de terpenos veja-se a referência 10.

3.8.1. Os hidrocarbonetos terpênicos acíclicos são nomeados de acordo com as regras estabelecidas anteriormente para hidrocarbonetos acíclicos insaturados.



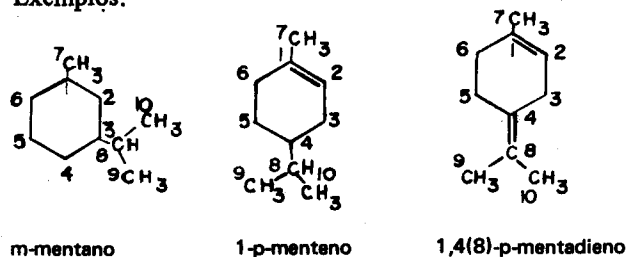
7-metil-3-metileno-1,6-octadieno

3.8.2. Os seguintes sistemas estruturais, com seus nomes e numeração própria, são utilizadas como base para a nomenclatura de hidrocarbonetos terpênicos monocíclicos e bicíclicos. O nome "bornano" substitui "canfano" e "bornilano". O nome "norbornano" substitui "norcanfano" e "norbornilano".



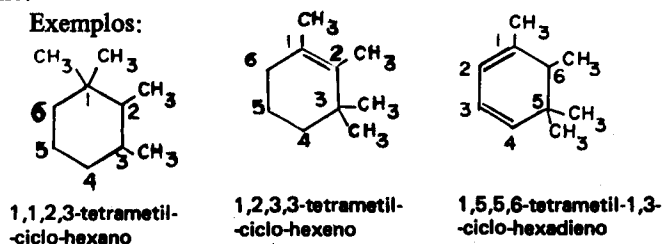
3.8.3. Os terpenos monocíclicos do tipo mentano (isômeros orto, meta e para, fórmula I da regra anterior) são chamados mentano, menteno, mentadieno, etc., e a numeração é dada acima. Os derivados destes sistemas são, entretanto, nomeados como hidrocarbonetos cíclicos comuns.

Exemplos:



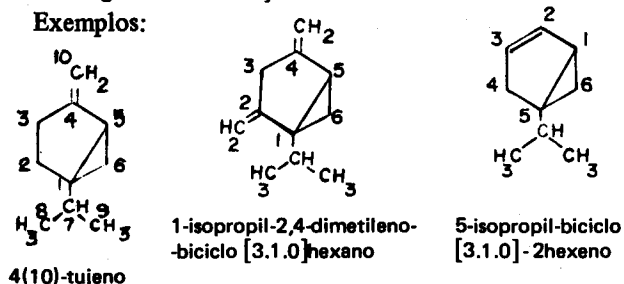
3.8.4. Os terpenos monocíclicos do tipo tetrametil-ciclo-hexano são nomeados sistematicamente como derivados do ciclo-hexano, do ciclo-hexeno ou do ciclo-hexadieno.

Exemplos:



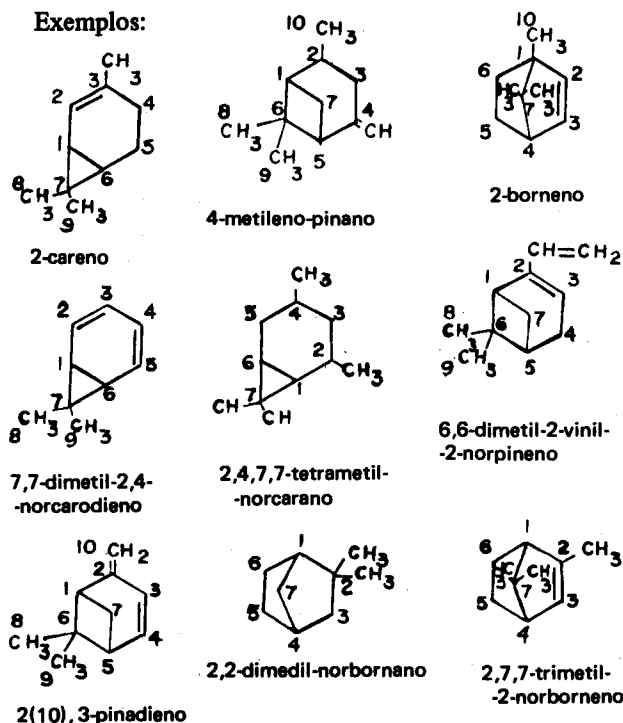
3.8.5. Os terpenos bicíclicos com o esqueleto carbônico do tujano (fórmula II da regra 3.8.2.) ou este esqueleto e cadeias laterais que não sejam metila ou isopropila (ou, ainda, metileno, caso um grupo metileno já esteja presente) são nomeados como tujano, tujeno, etc., e têm a numeração convencional para o tujano. Os demais derivados do tujano são nomeados como derivados de biciclo [3.1.0] hexano e seguem a numeração sistemática.

Exemplos:

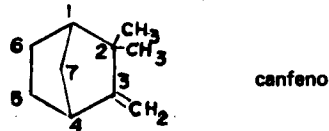


3.8.6. Os hidrocarbonetos terpênicos bicíclicos com os esqueletos carbônicos das fórmulas III, IV e V da regra 3.8.2. e cadeias laterais que não sejam metila (ou metileno, caso um grupo metileno já esteja presente) são nomeados, respectivamente, como carano, careno, caradieno, etc.; pirano, pireno, piradieno, etc.; bornano, borneno, bornadieno, etc., e recebem as numerações convencionadas na regra 3.8.2. Os terpenos com os esqueletos das fórmulas VI, VII e VIII e seus derivados são nomeados, respectivamente como derivados de norcarano, norcareno, norcaradieno, etc., norpirano, norpireno, norpiradieno, etc.; norbornano, norborneno, norbornadieno, etc., e recebem a numeração sistemática dos sistemas bicíclicos comuns.

Exemplos:



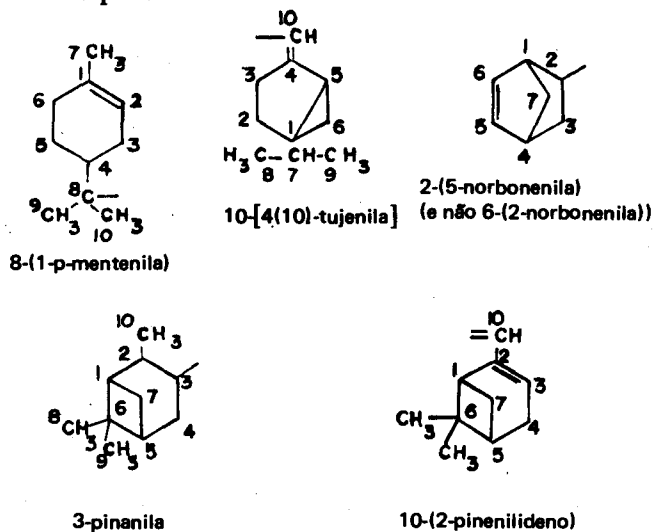
3.8.7. Mantém-se o nome "canfeno" para o composto 2,2-dimetil-3-metileno-norbornano não substituído.



3.8.8. Os radicais simples derivados dos hidrocarbonetos terpênicos acíclicos seguem a nomenclatura e a numeração sistemática. Mantêm-se, entretanto, os nomes triviais gerani-la, nerila, linalila e fitila para os radicais não substituídos.

3.8.9. Os radicais derivados do mentano, pirano, tujano, carano, bornano, norbornano, norcarano e norpirano são nomeados como mentila, mentenila, etc.; pinanila, pinenila, etc.; tujila, tujenila, etc.; carila, carenila, etc.; bornila, bornenila, etc.; norbornila, norbornenila, etc.; norcarila, norcarenila, etc.; e norpinanila, norpinenila, etc.. A numeração do hidrocarboneto original é mantida. Os átomos de carbono com as valências livres recebem o número mais baixo possível, tendo precedência sobre insaturações.

Exemplos:



4. B – SISTEMAS HETEROCÍCLICOS

4.1. Extensão do sistema de Hantzsch-Widman

4.1.1. Os compostos monocíclicos que contêm um ou mais de um heteroátomo em anéis de três a dez átomos são nomeados combinando-se os prefixos designativos do elemento com os sufixos apropriados, ambos listados abaixo. O estado de hidrogenação é indicado pelo sufixo ou pelos prefixos “di-hidro”, “tri-hidro”, etc., de acordo com a regra 4.1.2.

Elemento	Prefixo	Elemento	Prefixo
oxigênio	oxa	antimônio	estiba*
enxofre	tia	bismuto	bisma
selênio	selena	silício	sila
telúrio	telura	germânio	germa
nitrogênio	aza	estanho	estana
fósforo	fosfa*	chumbo	plumba
arsênio	arsa*	mercúrio	mercúra
		boro	bora

Nº de átomos do anel

3
4
5
6
7
8
9
10

Anéis contendo nitrogênio

insaturados

irina
eta
ola
ina
epina
ocina
onina
ecina

saturados

iridina
etidina
olidina

Anéis não contendo N

insaturados **

irena
eta
ola
ina
epina
ocina
onina
ecina

saturados

irana
etana
olana
ana ****
epana
ocana
onana
ecana

Exemplos:



4.1.2. Os sistemas heterocíclicos cuja insaturação é menor que a correspondente ao número máximo de duplas ligações não-cumulativas são nomeados pela utilização dos prefixos “di-hidro”, “tri-hidro”, etc. No caso de quatro ou cinco átomos, utiliza-se, entretanto, um sufixo especial para os anéis contendo apenas uma dupla ligação, quando mais de uma dupla ligação não-cumulativa é possível.

* Quando inteiramente seguido por “ina”, “fosfa” deve ser substituído por “fosfor”, “arsa” por “arsen” e “estiba” por “antimon”.

** Contendo o número máximo de duplas ligações não-cumulativas.

*** O nome é feito pela adição do prefixo “per-hidro” ao nome do heterociclo insaturado correspondente.

**** Não aplicável a compostos de silício, germânico, estanho e chumbo. Nestes casos, per-hidro é colocado como prefixo ao nome do heterociclo insaturado correspondente.

Nº de átomos no anel

Anéis contendo nitrogênio

Anéis não contendo N

4

etina

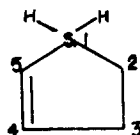
etena

5

olina

olena

Exemplos:



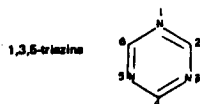
3-silolena



1,2-arsa-3-etina

4.1.3. A multiplicidade de um mesmo heteroátomo é indicada pelos prefixos "di", "tri", "tetra", etc., colocados antes do prefixo indicativo da natureza do heteroátomo.

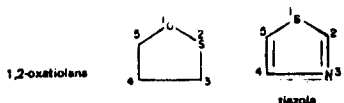
Exemplo:



1,3,5-triazina

4.1.4. Se dois ou mais heteroátomos diferentes estão presentes, os prefixos indicativos de sua natureza são citados na ordem decrescente do grupo a que pertencem os elementos na tabela periódica. Caso os elementos pertençam ao mesmo grupo, observa-se a ordem crescente dos números atômicos.

Exemplos:

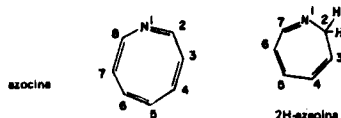


1,2-oxaztiolena

tiazole

4.1.5. Havendo apenas um heteroátomo no composto, a numeração é iniciada por ele, prosseguindo na sequência que conferir às insaturações ou ramificações os menores números possíveis. No entanto, quando o composto tem o número máximo possível de ligações duplas não-cumulativas e há uma escolha para a localização dos hidrogênios correspondentes aos carbonos saturados, estes têm a preferência.

Exemplos:

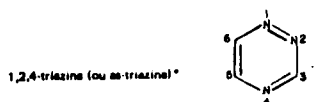


azocina

2H-azepina

4.1.6. Quando o mesmo heteroátomo ocorre mais de uma vez no composto, a numeração é escolhida de forma a que estes recebam os menores números.

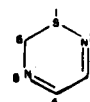
Exemplos:



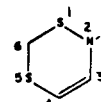
1,2,4-triazina (ou as-triazina)*

4.1.7. Quando heteroátomos diferentes ocorrem no mesmo composto, dá-se o número 1 ao heteroátomo primeiro citado no nome (regra 4.1.4). A numeração é então escolhida de modo a dar os menores números aos demais heteroátomos.

Exemplos:



6H-1,2,5-tiadiazina** (e não 3H-2,1,4-tiadiazina ou 2H-1,3,6-tiadiazina)



2H,6H-1,5,2-ditiazina** (e não 2H,4H-1,3,4-ditiazina ou 2H,6H-1,3,6-ditiazina ou, ainda, 4H,6H-1,5,4-ditiazina)

4.2. Nomes triviais e semi-triviais

4.2.1. Mantêm-se os seguintes nomes triviais e semi-triviais para compostos heterocíclicos e radicais derivados, e como base para a nomenclatura de anéis fundidos.

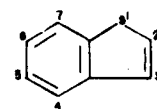
composto principal



tiofeno

(1)

composto principal



benzo[b]tiofeno
(substituindo tianafteno)

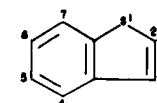
nome do radical



2-tienila

(2)

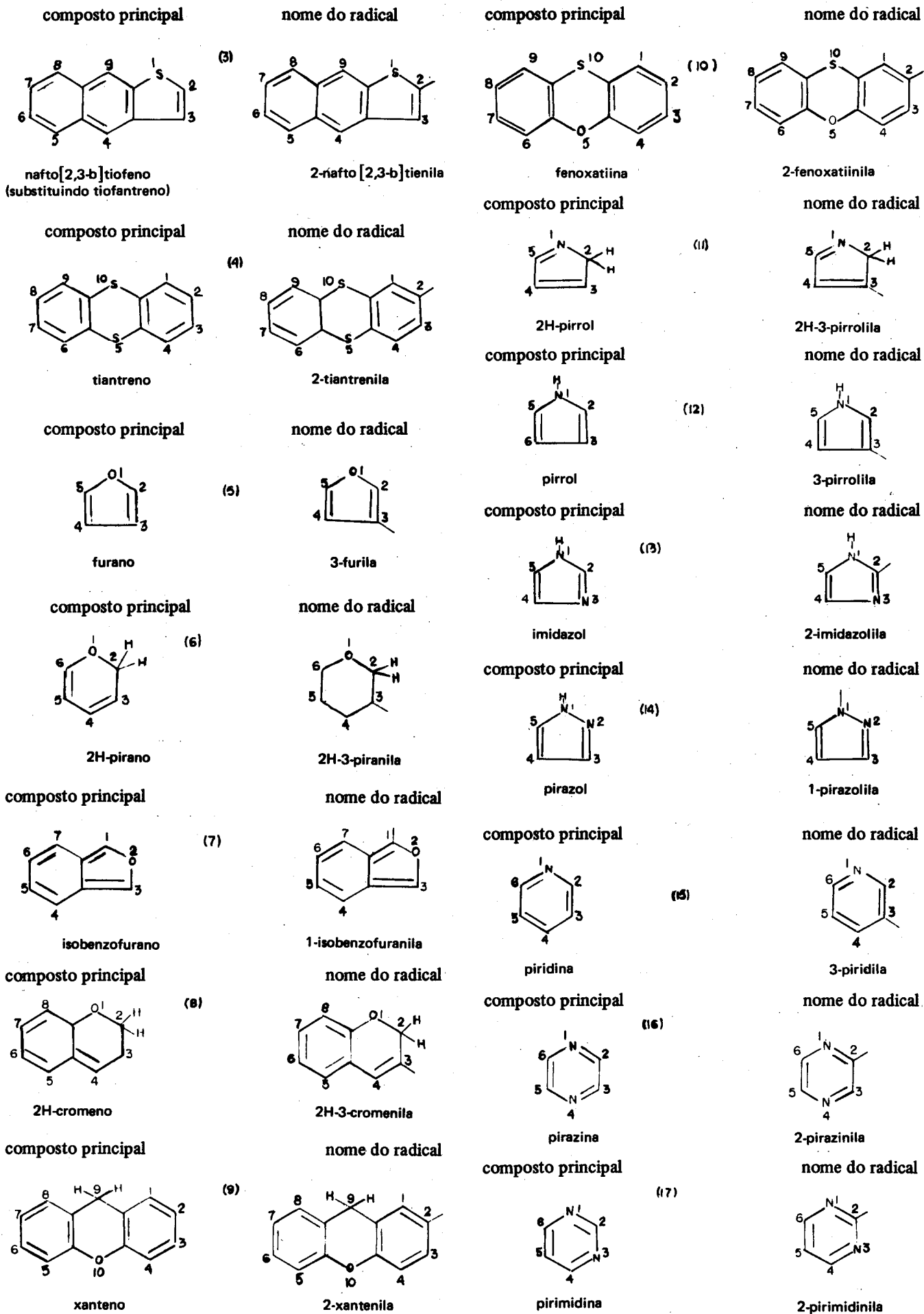
nome do radical



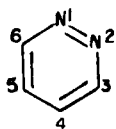
2-benzo[b]tienila

* "as", de "assimétrica".

** No primeiro exemplo, a numeração deve iniciar-se no átomo de enxofre, o que elimina 2,1,4-tiadiazina. Como o átomo de nitrogênio deve receber o menor número, fica também eliminada a hipótese 1,3,6-tiadiazina. No segundo exemplo, a numeração deve iniciar-se em um dos átomos de enxofre. A escolha é determinada pelo menor conjunto de números obtidos. Como 1,2,5 é menor do que 1,3,5; 1,3,6 ou 1,4,5 o anel terá o nome 1,5,2-ditiazina.



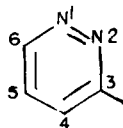
composto principal



piridazina

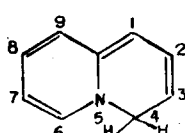
(18)

nome do radical



3-piridazinila

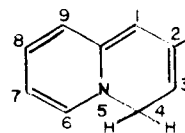
composto principal



4H-quinolizina

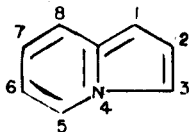
(25)

nome do radical



4H-2-quinolizina

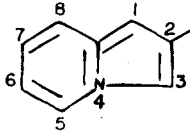
composto principal



indolizina

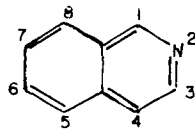
(19)

nome do radical



2-indolizina

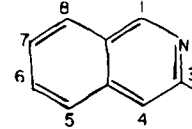
composto principal



isoquinolina

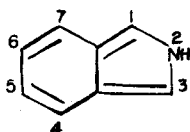
(26)

nome do radical



3-isoquinolila

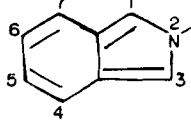
composto principal



isoindol

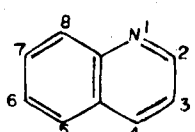
(20)

nome do radical



2-isoindolila

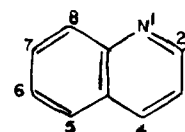
composto principal



quinolina

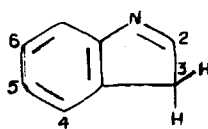
(27)

nome do radical



2-quinolila

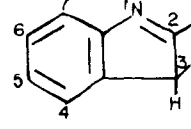
composto principal



3H-indol

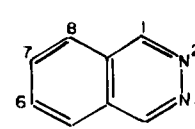
(21)

nome do radical



3H-2-indolila

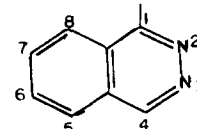
composto principal



ftalazina

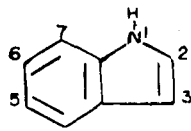
(28)

nome do radical



1-ftalazinila

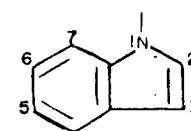
composto principal



indol

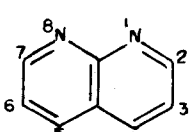
(22)

nome do radical



1-indolila

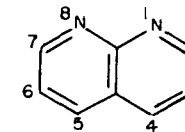
composto principal



1,8-naftiridina

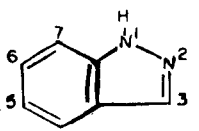
(29)

nome do radical



2-(1,8-naftiridinila)

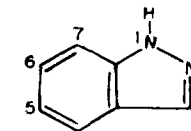
composto principal



1H-indazol

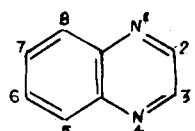
(23)

nome do radical



1H-3-indazolila

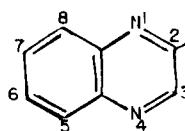
composto principal



quinoxalina

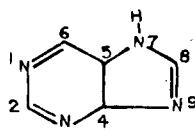
(30)

nome do radical



2-quinolaxalina

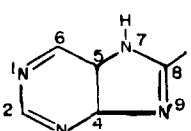
composto principal



purina

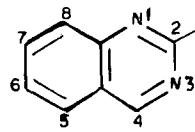
(24)

nome do radical



8-purinila

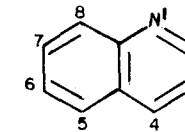
nome do radical



2-quinazolinila

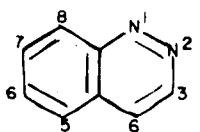
(31)

composto principal



quinazolina

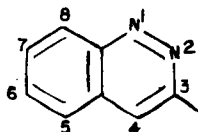
Composto principal



cinolina

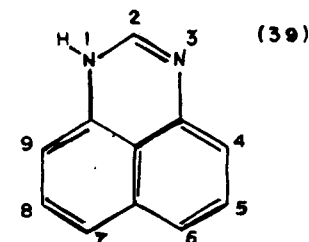
Nome do radical

(32)



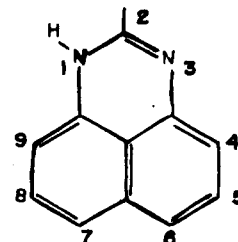
3-cinolinila

Composto principal



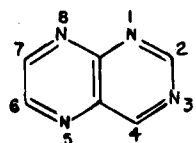
perimidina

Nome do radical



2-perimidinila

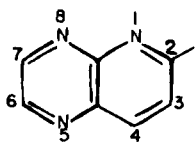
Composto principal



pteridina

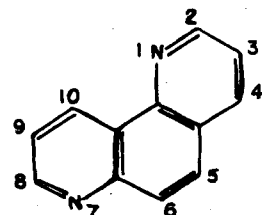
Nome do radical

(33)



2-pteridinila

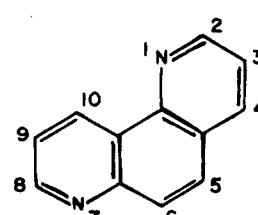
Composto principal



1,7-fenantrolina

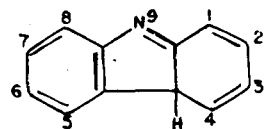
Nome do radical

(40)



3-(1,7-fenantrolinila)

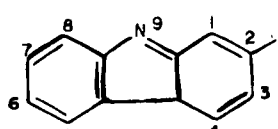
Composto principal



4 aH-carbazol*

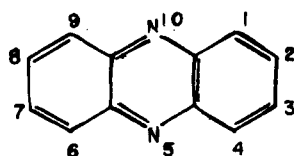
Nome do radical

(34)



4 aH-2-carbazolila

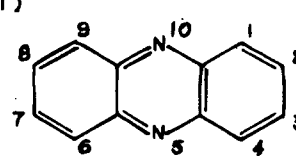
Composto principal



fenazina

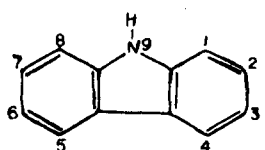
Nome do radical

(41)



1-fenazinila

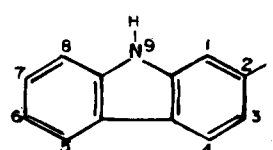
Composto principal



carbazol*

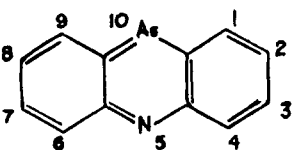
Nome do radical

(35)



2-carbazolila

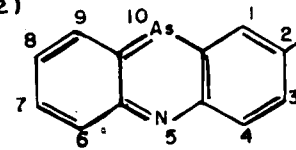
Composto principal



fenarsazina

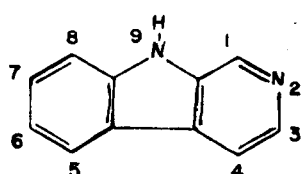
Nome do radical

(42)



2-fenarsazinila

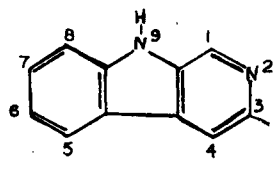
Composto principal



β -carbolina

Nome do radical

(36)



3-(β -carbolina)

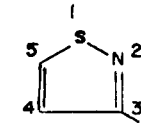
Composto principal



isotiazola

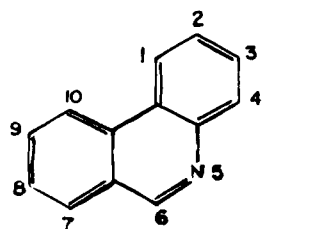
Nome do radical

(43)



3-isotiazolila

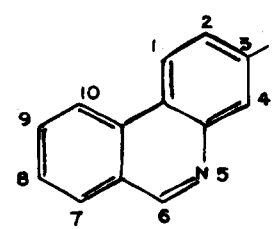
Composto principal



fenantridina

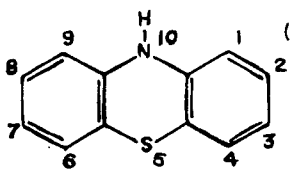
Nome do radical

(37)



3-fenantridinila

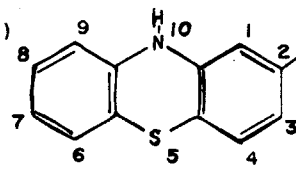
Composto principal



fenotiazina

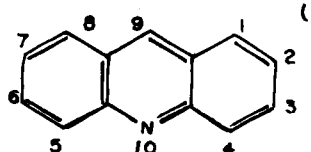
Nome do radical

(44)



2-fenotiazinila

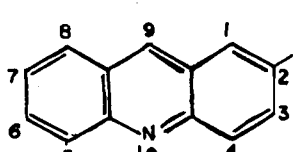
Composto principal



acridina*

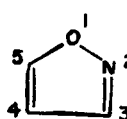
Nome do radical

(38)



2-acridinila

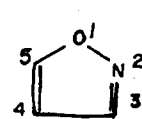
Composto principal



isoxazola

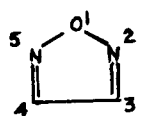
Nome do radical

(45)



3-isoxazolila

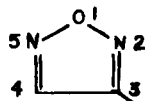
Composto principal



(46)

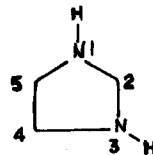
furazano

Nome do radical



3-furazanila

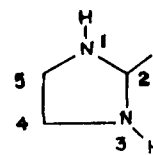
Composto principal



(5)

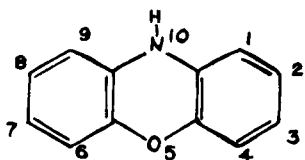
imidazolidina

Nome do radical



2-imidazolidinila

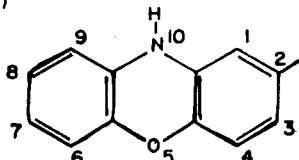
Composto principal



fenoxazina

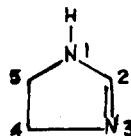
(47)

Nome do radical



2-fenoxazinila

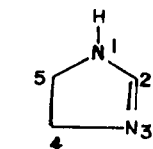
Composto principal



(6)

2-imidazolina (também 3-imidazolina)

Nome do radical

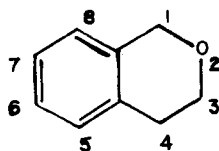


4-(2-imidazolinila)

Observação: O Chemical Abstracts prefere o uso de 2H-1-benzopirano ao invés de cromeno (8) e 9H-pirido [3,4-b] indol ao invés de β-carbolina (36).

4.2.2. Mantêm-se os seguintes nomes triviais e semi-triviais para compostos heterocíclicos e radicais deles derivados. No entanto, os mesmos não são recomendados como base para a nomenclatura de compostos heterocíclicos fundidos.

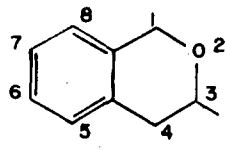
Composto principal



isocromano

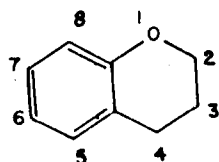
(1)

Nome do radical



3-isocromanila

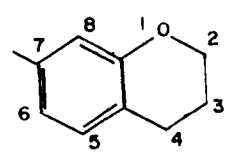
Composto principal



cromano

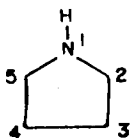
(2)

Nome do radical



7-cromanila

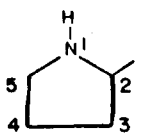
Composto principal



pirrolidina

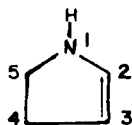
(3)

Nome do radical



2-pirrolidinila

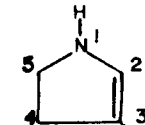
Composto principal



2-pirrolina (também 3-pirrolina)

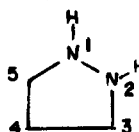
(4)

Nome do radical



3-(2-pirrolinila)

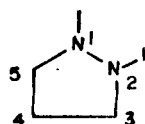
Composto principal



(7)

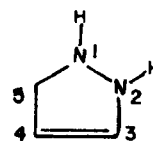
pirazolidina

Nome do radical



1-pirazolidinila

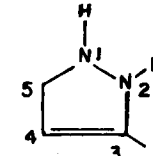
Composto principal



(8)

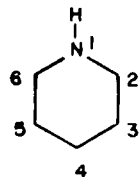
3-pirazolina (também 2-pirazolina)

Nome do radical



3-(3-pirazolinila)

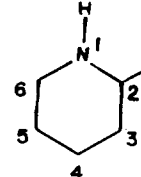
Composto principal



piperidina

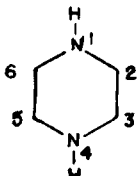
(9)

Nome do radical



2-piperidila

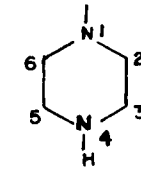
Composto principal



piperazina

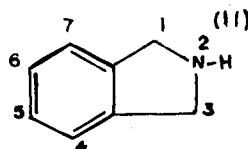
(10)

Nome do radical



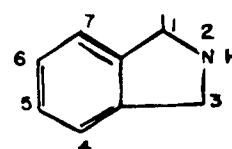
1-piperazinila

Composto principal



isoindolina

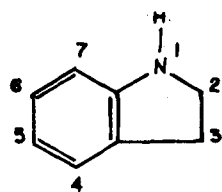
Nome do radical



1-isoindolinila

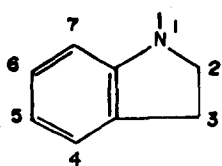
* Exceção à numeração sistemática.

Composto principal



indolina

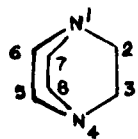
Nome do radical



1-indolinila

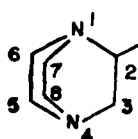
(12)

Composto principal



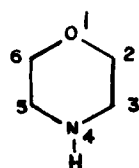
quinuclidina

Nome do radical



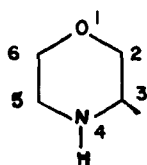
2-quinuclidinila

(13)



morfolina

Nome do radical



3-morfolinila

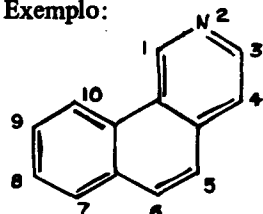
(14)

4.3. Sistemas heterocíclicos fundidos

4.3.1. Os compostos cíclicos "orto-fundidos" e "orto-perifundidos" contendo heteroátomos são nomeados de acordo com os mesmos princípios utilizados para os hidrocarbonetos fundidos (Parte I). O composto principal deve ser um heterociclo. Se uma escolha é possível, usam-se os critérios abaixo, sucessivamente, para decidir qual o composto principal.

(i) O componente contendo nitrogênio.

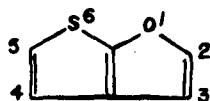
Exemplo:



benzo [h] isoquinolina (e não pirido [3,4-a] naftaleno)

(ii) O componente contendo um outro heteroátomo, segundo a preferência estabelecida na regra 4.1.4.

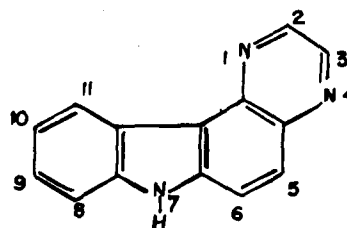
Exemplo:



tieno [2,3-b] furano (e não furo [2,3-b] tiofeno)

(iii) O componente contendo o maior número de anéis.

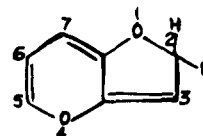
Exemplo:



7H-pirazino[2,3-c]carbozol (e não 7H-indolo[3,2-f]quinoxalina)

(iv) O componente contendo o maior anel.

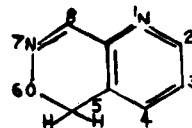
Exemplo:



2H-furo[3,2-b]pirano (e não 2H-pirano[3,2-b]piradina)

(v) O componente contendo o maior número de heteroátomos.

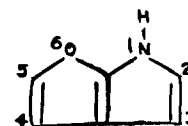
Exemplo:



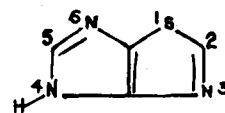
5H-pirido[2,3-d][1,2]oxazina (e não [1,2]oxazino[4,5-b]piradina)

(vi) O componente contendo a maior variedade de heteroátomos.

Exemplo:



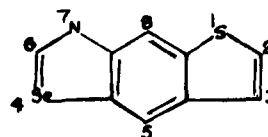
1H-pirazolo[4,3-d]oxazol (e não 1H-oxazolo [5,4-c]pirazol)



4H-imidazo[4,5-d]tiazol (e não 4H-tiazol [4,5-d]imidazol)

(vii) O componente que tiver mais heteroátomos de maior precedência segundo a regra 4.1.4.

Exemplo:

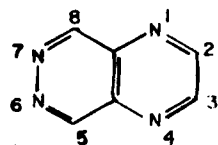


selenazolo [5,4-f]benzotiazol (e não tiazolo [5,4-f]benzoeselenazol)

Observação: N e S têm preferência sobre N e Se.

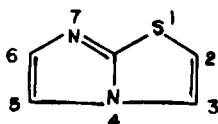
(viii) Se uma escolha é possível entre componentes de mesmo tamanho, contendo o mesmo número e tipos de heteroátomos, dá-se preferência ao sistema básico que tenha os menores números nos heteroátomos mais próximos da face de fusão.

Exemplo:



furo[3,4-c]cinolina

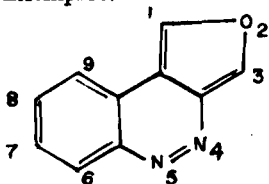
4.3.2. Se um heteroátomo é comum a dois anéis, os nomes dos componentes são escolhidos como se ambos contivessem o heteroátomo.



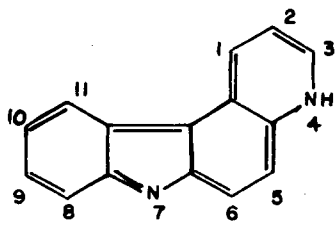
pirazino [2,3-d]piridazina

4.3.3. As seguintes abreviações de prefixos podem ser usadas: furo, imidazo, isoquino, pirido, pirimido, quino e tieno.

Exemplos:



imidazo [2,1-b]tiazol

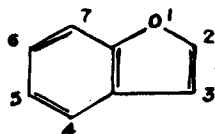


4H-pirido[2,3-c]carbazol

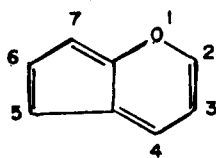
4.3.4 Na numeração do sistema policíclico completo, os sistemas parciais são orientados e numerados de acordo com os mesmos princípios estabelecidos para os hidrocarbonetos policíclicos fundidos. Quando uma escolha de orientação é possível, usam-se, sucessivamente os critérios abaixo até que uma decisão seja possível:

(i) Os heteroátomos devem ter os menores números possíveis.

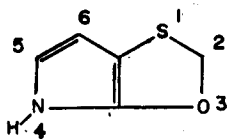
Exemplos:



benzo [b] furano



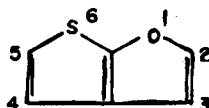
ciclo-penta [b] pirano



4H-[1,3]oxatiolo[5,4-b]pirrol

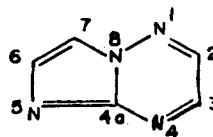
(ii) Os menores números são dados aos diferentes heteroátomos, quando houver mais de um, na ordem de precedência da regra 4.1.4.

Exemplo:

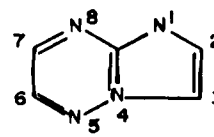


tieno[2,3-b]furano

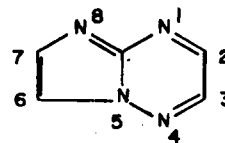
(iii) Os átomos de carbono comuns a dois ou mais anéis devem ter os menores números.



e não



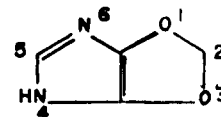
ou



imidazo[1,2-b][1,2,4]triazina (ou imidazo[1,2-b]-s-triazina)

(iv) Os átomos de hidrogênio indicados recebem os menores números possíveis.

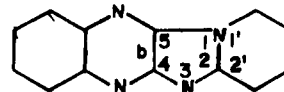
Exemplos:



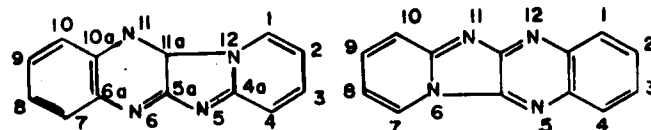
4H-1,3-dioxolo[4,5-d]-imidazol

(v) O heterociclo policíclico fundido é numerado como os hidrocarbonetos, porém, dá-se números a todos os heteroátomos, mesmo quando comuns a dois ou mais anéis. Os heteroátomos interiores são numerados por último.

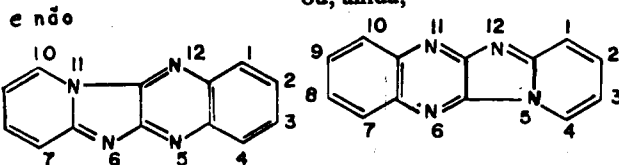
4.3.5. Quando mais que um par de colchetes é necessário para nomear o composto os pontos de ligação do componente usado como prefixo são indicados por números primados e não primados. Os números não primados são reservados ao componente que se liga diretamente ao componente básico, assim,



então,



ou, ainda,

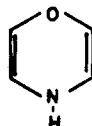


ou

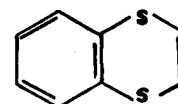
pirido [1',2'; 1,2]imidazo [4,5-b]quinoxalina

4.4. Nomenclatura alternativa (nomenclatura "a")

4.4.1 (a) Método de Stelzner. Neste método, o prefixo designativo do heteroátomo é anexado ao nome do hidrocarboneto homocíclico com a mesma distribuição de ligações duplas nos anéis. Assim, I é relacionado mais propriamente ao 1,4-ciclo-hexadieno e II, ao 1,4-di-hidro-naftaleno.



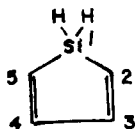
(I)



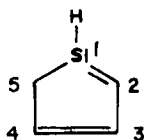
(II)

(b) Método do Chemical Abstracts. Se o composto homocíclico correspondente é parcial ou completamente hidrogenado e se o estado de hidrogenação é determinado no nome sem o auxílio do prefixo hidro, di-hidro, etc., procede-se como no método de Stelzner. Nos demais casos, o hidrocarboneto homocíclico é aquele que contém o número máximo de duplas ligações conjugadas ou isoladas. Os prefixos "hidro" são então adicionados.

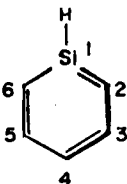
Exemplos:



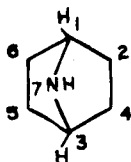
Método Stelzner sila-2,4-ciclo-pentadieno ou, no Método do Chemical Abstracts sila-2,4-ciclo-pentadieno



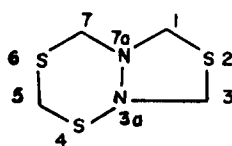
sila-1,3-ciclo-pentadieno
ou
sila-1,3-ciclo-pentadieno



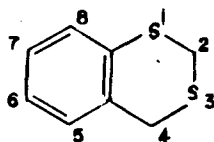
silabenzeno
ou
silabenzeno



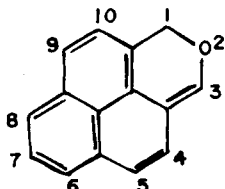
7-azabicyclo 2.2.1 heptano
ou
7-azabicyclo 2.2.1 heptano



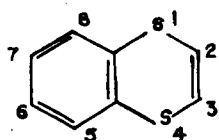
1,3-ditia-1,2,3,4-tetra-hidro-naftaleno
ou
4H-1,3-ditianaftaleno



2,4,6-tritia-3a,7a-diazaper-hidro-indeno
ou
2,4,6-tritia-3z,7a-diazaindenu



2-oxa-1,2-di-hidro-pireno
ou
1H-2-oxapireno



1,4-ditia-1,4-di-hidro-naftaleno
ou
1,4-ditianaftaleno

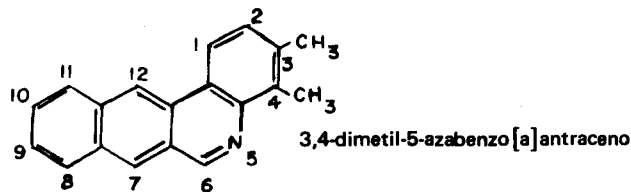


2,7,9-triazafenantreno
ou
2,7,9-triazafenantreno

4.4.2. Em nomes de compostos fundidos, o prefixo designativo do heteroátomo precede o nome completo do hidrocarboneto principal. Se dois ou mais tipos de heteroátomos ocorrem no mesmo nome, é aplicável o procedimento da re-

gra 4.1.4. Os prefixos relacionados a cadeias laterais precedem o nome do heteroátomo como um todo.

Exemplo:



3,4-dimetil-5-azabenz[a]antraceno

4.3.3. Quando do emprego da regra 4.4.1. (b), o heterociclo policíclico tem a numeração do composto carbocíclico correspondente. Quando uma escolha é possível, o anel é numerado de modo a dar (a) os menores números aos heteroátomos e (b) os menores números aos heteroátomos que tenham precedência, de acordo com a regra 4.1.4.

4.5. Radicais derivados de compostos heterocíclicos

4.5.1. Os radicais univalentes derivados de compostos heterocíclicos pela remoção de hidrogênio de um anel são nomeados pela adição do sufixo "ila" ao nome dos heterociclos correspondentes, com elisão do "a" ou "o" finais.

Exemplos: indolila, de indol

pirrolinila, de pirrolina

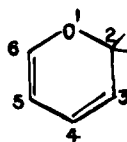
triazolila, de triazol

triazinila, de triazina

Mantêm-se as seguintes exceções: furila (de furano), piridila (de piridina), piperidila (de piperidina), quinolila (de quinolina), isoquinolila (de isoquinolona) e tienila (de tiofeno). No entanto, prefere-se os nomes "piperidino" e "morfolino" a "1-piperidila" e "4-morfolinila".

4.5.2. Os radicais bivalentes derivados de radicais monovalentes heterocíclicos pela remoção do segundo hidrogênio do átomo com a valência livre não nomeados por substituição do sufixo "ila" por "ilideno".

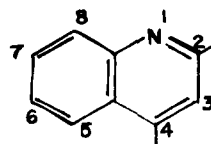
Exemplo:



2-piranilideno

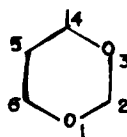
4.5.3. Os radicais multivalentes derivados de heterociclos pela remoção de dois ou mais de dois hidrogênios de átomos diferentes de anel são nomeados pela adição dos sufixos "diila", "triila", etc., ao nome do heterociclo original.

Exemplo:

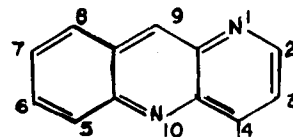


2,4-quinolinadiila

4.5.4. A utilização da nomenclatura alternativa da regra 4.4. não afeta a nomenclatura de radicais, análoga à dos radicais derivados dos hidrocarbonetos correspondentes, exceto no que diz respeito à numeração.

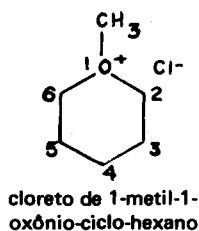
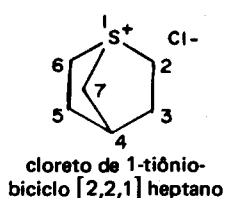
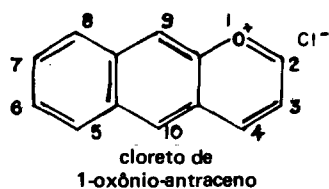


1,3-dioxa-4-ciclo-hexila



1,10-diaza-4-antrila

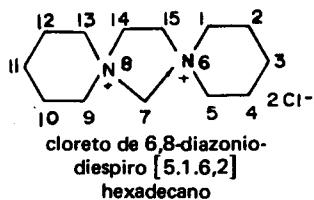
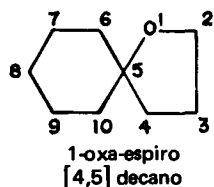
4.5.5. Os compostos heterocíclicos catiônicos são nomeados de acordo com as regras precedentes, pela substituição dos prefixos "oxa", "tia", "aza" por "oxônio", "tiônio", "azônio". O ânion é designado da maneira usual.



5. ESPIRO-HETEROCÍCLICOS

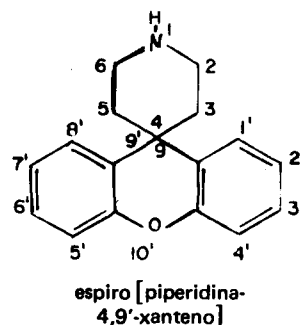
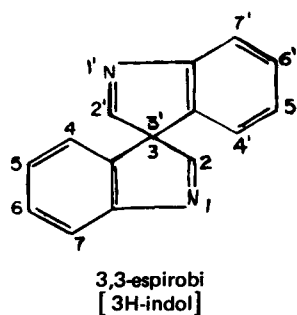
5.1. Os espiro-heterocíclicos contendo unidades monocíclicas podem ser nomeados pela adição dos prefixos indicativos de heteroátomos (regra 4.1.1.) aos nomes dos espiranos. A numeração dos espiranos é mantida e os heteroátomos recebem os números mais baixos possíveis coerentes com a numeração fixada para os anéis. Quando uma escolha é possível, dá-se aos heteroátomos uma numeração mais baixa do que às duplas ligações.

Exemplos:



5.2. Se pelo menos uma das unidades de um espiro-heterocíclico é um sistema policíclico fundido, seguem-se as regras correspondentes (Parte II), dando ao espiro-átomo o número mais baixo possível coerente com a numeração dos sistemas componentes.

Exemplos:



5.3. Como alternativa às regras anteriores, pode-se nomear os espiro-compostos heterocíclicos aplicando-se as regras 3.5.1. a 3.5.11 utilizando-se os seguintes critérios quando necessário: (a) os espiro-átomos recebem os números mais baixos coerentes com a numeração dos sistemas componentes; (b) componentes heterocíclicos têm prioridade sobre componentes homocíclicos do mesmo tamanho e (c) a prioridade dos componentes heterocíclicos é decidida de acordo com a regra 4.3.1. Usam-se parênteses sempre que necessário para clarear expressões complexas.

