

- <sup>27</sup> Rein, R.; *Adv. Quant. Chem.* (1973) 7, 735.
- <sup>28</sup> Pullman, A.; Perahia, D.; *Theor. Chim. Acta* (1978) 48, 29.
- <sup>29</sup> Böttcher, C.F.J.; "Theory of Electric Polarization", Elsevier, N.Y. (1973).
- <sup>30</sup> Langlet, J.; Claverie, P.; Caron, F.; Boeue, J.C.; *Int. J. Quant. Chem.* (1981) 19, 299.
- <sup>31</sup> Goldblum, A.; Perahia, D.; Pullman, A.; *Int. J. Quant. Chem.* (1979) 15, 121.
- <sup>32</sup> Pullman, A.; Berthod, H.; *Int. J. Quantum Chem., Quantum Biol. Symp.* (1977) 4, 327.
- <sup>33</sup> Pullman, A.; Berthod, H.; *Theoret. Chim. Acta* (1978) 48, 269.
- <sup>34</sup> Pullman, A.; Zakrwevska, K.; Perahia, D.; *Int. J. Quantum Chem.* (1979) 16, 295.
- <sup>35</sup> Pullman, A.; Pullman, B.; Lavery, R.; "Nucleic Acids: The Vectors of Life", Eds. Pullman, B.; Jortner, J.; Reidel Publishing Co. 75 (1983).
- <sup>36</sup> Suddath, F.L.; Quigley, G.J.; McPherson, A.; Sneden, D.; Kim, J.J.; Kim, S.H.; Rich, A.; *Nature* (1974) 248, 20.
- <sup>37</sup> Robertus, J.D.; Ladner, J.E.; Finch, J.T.; Rhodes, D.; Brown, R.S.; Clark, B.F.C.; Klug, A.; *Nature* (1974) 250, 546.
- <sup>38</sup> Sussman, J.L.; Holbrook, S.R.; Warrant, R.W.; Church, G.M.; Kim, S.H.; *J. Mol. Biol.* (1978) 123, 607.
- <sup>39</sup> Lavery, R.; Pullman, A.; *Int. J. Quantum Chem.* (1981) 20, 49.
- <sup>40</sup> Pauling, L.; "The Nature of the Chemical Bond", 3ª edição, Cornell Press (1969) 260.
- <sup>41</sup> Clementi, E.; André, J.M.; André, M.C.; Klint, D.; Hahn, D.; *Acta. Phys. Hung.* (1969) 27, 493.
- <sup>42</sup> Roos, B.; Siegbahn, P.; *Theoret. Chim. Acta* (1970) 17, 209.
- <sup>43</sup> Pullman, B.; Gresh, N.; Berthod, H.; Pullman, A.; *Theoret. Chim. Acta* (1977) 44, 151.
- <sup>44</sup> Litt, M.; Greenspan, C.M.; *Biochemistry* (1972) 11, (1972).
- <sup>45</sup> Litt, M.; *Biochemistry*, (1969) 8, 3249.
- <sup>46</sup> Demoulin, D.; Armbruster, A.M., Pullman, B.; *Theoret. Chim. Acta.* (1978) 48, 143.
- <sup>47</sup> Rhodes, D.; *J. Mol. Biol.* (1975) 94, 449.
- <sup>48</sup> Wing, R.; Drew, H.R.; Takano, T.; Broka, C.; Tanaka, S.; Itakura, K.; Dickerson, R.E.; *Nature* (1980) 287, 755.
- <sup>49</sup> Drew, H.R.; Wing, R.; Takano, T.; Broka, C.; Tanaka, S.; Itakura, K.; Dickerson, R.E.; *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (1981) 78, 2179.
- <sup>50</sup> Drew, H.R.; Dickerson, R.E.; *Mol. Biol.* (1981) 151, 535.
- <sup>51</sup> Drew, H.R.; Samson, S.; Dickerson, R.E.; *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (1982) 79, 4040.
- <sup>52</sup> Kopka, M.L.; Fratini, A.V.; Drew, H.R.; Dickerson, R. E.; *J. Mol. Biol.* (1983) 163, 129.

## DIVULGAÇÃO

### AINDA SOBRE A NOMENCLATURA DE COMPOSTOS ORGÂNICOS EM LÍNGUA PORTUGUESA

Cláudio Costa Neto

*Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro*

Recebido em 07/01/86; Cópia revisada em 06/06/89

A nomenclatura de compostos orgânicos em língua portuguesa tem recebido atenção por parte dos químicos brasileiros já há algum tempo. A área do Rio de Janeiro tem se mostrado particularmente atenta ao problema. Assim, a primeira publicação a tratar do assunto de forma abrangente, e com vistas a adaptar as regras da União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) ao vernáculo, foi apresentada em 1944 pelos Professores O. Rothe, A. Difini e P.S. Lacaz ao IV Congresso Brasileiro de Química. A sua publicação na íntegra, só ocorreu, no entanto, em 1955, através da revista *Engenharia e Química*<sup>1</sup>.

Muito embora os Professores Rothe e Lacaz pertencessem à (então) Universidade do Brasil, as sugestões contidas naquele artigo encontraram uma série de barreiras no âmbito da Escola de Química daquela Universidade, devido às novidades que apresentava: por exemplo, a proposta do uso do termo *alqueno* ao invés de *alceno*, a utilização

dos termos *pirrola*, *tiofena* etc. Talvez por que as propostas deste documento fossem contrárias às tradições da EQ, as sugestões do citado artigo permaneceram nele mesmo e lá não tiveram ressonância.

No V Congresso Brasileiro de Química, realizado em Porto Alegre em 1947, o Professor Militino C. Rosa, da mesma Escola de Química, apresentou uma série de sugestões à nomenclatura dos compostos orgânicos<sup>2</sup>, mas foi só em 1961 que publicou<sup>3</sup> um longo e substanciado comentário sobre o trabalho de Rothe et al.. Neste artigo, volta à tona a discussão sobre a propriedade do uso dos termos *alcoila* ou *alquila*, *alqueno* ou *alceno* etc. Em 1964, o Diretório Acadêmico da Escola de Química republicou, em homenagem póstuma, os artigos sobre Nomenclatura de Química Orgânica do Professor Militino<sup>4</sup>, acrescido de mais um, inédito, que tratava do uso de hífen, posição de numerais etc.

Registre-se que em 1952 as Sub-Comissões de Química Orgânica e Química Mineral da Comissão de Revisão da Farmacopéia Brasileira propuseram uma "Nomenclatura de Química Orgânica para a Nova Edição da Farmacopéia Brasileira"<sup>5</sup>, de cunho mais tradicional.

No XII Congresso Brasileiro de Química, promovido pela Associação Brasileira de Química e realizado no Rio de Janeiro em 1963, em uma sessão voltada para tratar de assuntos sobre a nomenclatura química, ainda se procurava um denominador comum para a nomeação dos compostos orgânicos em língua portuguesa, o que se tornava cada vez mais necessário já que, aos poucos, novos termos eram lançados pela emergente sociedade de químicos brasileiros. A reunião terminou sem que qualquer recomendação objetiva tivesse resultado, a não ser as clássicas propostas de se continuar a estudar o problema e a de se constitui uma comissão para orientar os trabalhos.

Esta preocupação de nomear compostos utilizando o vernáculo se estendeu também às áreas particulares da química. Assim, em 1964, a Professora Eloisa B. Mano, da Escola de Química, juntamente com o Químico Aluísio A. de Araújo, do Instituto Nacional de Tecnologia, propuseram uma "Terminologia Relativa a Polímeros em Língua Portuguesa"<sup>6</sup> à VI Reunião Anual da Divisão de Química Orgânica e Bioquímica da Seção Regional do (então) Estado da Guanabara da Associação Brasileira de Química.

Em 1965, Rangel<sup>7</sup>, interessado em que se estabelecesse uma recomendação para a nomeação de compostos orgânicos para uso no curso secundário, reuniu para discussão no Congresso Brasileiro de Química daquele ano, os pontos de divergências entre os trabalhos de Rothe et al. e Rosa.

O aparecimento de um grande número de livros didáticos em língua portuguesa a partir de 1965, resultantes principalmente de tradução de livros estrangeiros — na sua grande maioria de língua inglesa contribuiu para aumentar ainda mais a confusão de nomeação de compostos orgânicos, já que, sem uma fonte de balisamento para a nomenclatura a ser usada, e valendo-se apenas da tradição oral dos diferentes grupos de química no país, muitos termos eram traduzidos o mais proximamente possível do original. Um exemplo disso é o termo *haleto* (do inglês "halide"): em português, o termo, que deriva de halogênio, deveria ser *halogeneto*.

Recentemente, o Professor Bicca de Alencastro, do Instituto de Química/UFRJ, vem de publicar em Química Nova<sup>8,9</sup>, uma série de artigos sobre as regras de nomenclatura para os compostos orgânicos, onde procura traduzir e adaptar, na sua forma mais ampla e completa, as regras da IUPAC ao vernáculo. Estas duas publicações e mais outras, que complementam as primeiras, foram reunidas em um volume sobre a "Nomenclatura de Química Orgânica — Uma versão da IUPAC"<sup>10</sup>, trabalho de grande envergadura no assunto.

Mas, apesar de todos estes esforços, ainda persistem divergências que dificultam a adoção de uma nomenclatura geral para a química orgânica no país.

Foi em meio a esta situação que me deparei com a necessidade pragmática de nomear (na verdade traduzir o nome do inglês) cerca de duas mil substâncias orgânicas, dentre as

mais comuns encontradas em laboratório, selecionadas para constituírem um "universo-primeiro" de substâncias para um livro-texto de Análise Orgânica.

Obviamente, a primeira tentativa feita neste sentido foi a de procurar utilizar as regras estabelecidas nas publicações descritas.

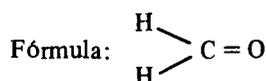
Este exercício conduziu a uma *visão global* de um universo de nomes, e permitiu ver, claramente, as divergências entre as proposições mencionadas. Mais do que isto porém, novas incoerências puderam ser detetadas em pontos tidos como já dominados. Foi visando trazer à discussão alguns destes pontos, e propor as mudanças julgadas cabíveis e necessárias, que o presente artigo foi escrito.

Em uma tomada panorâmica — a nível internacional — das proposições existentes para se representarem/nomearem os compostos orgânicos, podem-se perceber três classes bem distintas de propostas, a saber:

## 1. SISTEMAS QUE UTILIZAM LÓGICA\* MATEMÁTICA

a) Representação do composto pela MATRIZ DE CONECTIVIDADE E PELO POLINÔMIO CARACTERÍSTICO correspondente.

Spialter<sup>11,12,13</sup> propôs em 1963 que os compostos orgânicos poderiam ser representados por uma matriz em que os átomos constituiriam a diagonal principal e, no encontro das linhas e colunas figurariam propriedades de conectividade da referida ligação, como, por exemplo, ordem da ligação, distância interatômica etc. A matriz de ordem de ligação, por exemplo, forneceria um polinômio característico, unívoco, para cada composto. Um exemplo de utilização da matriz de conectividade e o seu polinômio característico é dado a seguir, para o aldeído fórmico.



MATRIZ DE CONECTIVIDADE DOS ÁTOMOS:

H	Ø	1	Ø
O	H	1	Ø
1	1	C	2
Ø	Ø	2	O

POLINÔMIO CARACTERÍSTICO:  $\text{H}^2 \text{CO} - 4\text{H}^2 - 2\text{HO}$

Neste sistema, portanto, a representação do composto é feita através de uma matriz de conectividade ou de um polinômio (ou equação) característico(a).

b) NOMENCLATURA NODAL. Proposta originalmente por Lozac'h com base na teoria dos grafos, é descrita detalhadamente em uma extensa publicação feita pelo autor

O termo *lógica* é aqui usado no seu sentido amplo, isto é, uma sucessão encadeada de raciocínios que se valem de um conjunto próprio de leis e de regras.

e colaboradores<sup>14</sup>. Por este sistema, por exemplo, o 4-propil-5-metil-nonano é denominado (9.3.4, 15) tridecanodano.

Os sistemas desta classe se baseiam em princípios precisos de lógica matemática e se propõem a definir o "nome" do composto a partir de suas unidades fundamentais (Nomenclatura Integral).

## 2. SISTEMAS QUE UTILIZAM LÓGICA DE ARQUIVAMENTO

a. **NÚMERO DE REGISTRO. O CHEMICAL ABSTRACTS** criou um sistema que confere um número (o Número de Registro), a cada substância<sup>15</sup>. Este sistema, de grande simplicidade, é semelhante ao do "CPF" (Cadastro de Pessoa Física) existente para cadastrar os contribuintes do Imposto de Renda na sociedade brasileira. O número de registro surgiu de uma necessidade de se concentrarem as informações sobre um dado composto em uma única entrada de um arquivo de dados, já que o nome conferido a um determinado composto, segundo as regras da IUPAC ou da nomenclatura vulgar, pode ser feito de mais de uma maneira.

Os Números de Registro não têm qualquer correlação com a estrutura do composto. Veja-se, por exemplo, o caso das Alaninas d, l e dl que têm como Números de Registro, 338-69-2, 56-41-7 e 302-72-7, respectivamente.

b. **NOTAÇÃO WISWESSER\***<sup>16</sup>. Este sistema foi criado especificamente para adequar o nome de uma substância química a um formato simples para uso em computadores. Sua preocupação é representar em linha qualquer tipo de estrutura química (reduz a estrutura tridimensional da molécula a uma notação de uma dimensão). Para tal, ele utiliza um conjunto muito próprio de regras. Por exemplo, a metil-n-propil-cetona é representada neste sistema pela notação 3VI. Já o metil-isopropil-carbinol (3-metil-2-butanol) é representado por QV1 & Y1 & 1. Este sistema tem sido usado na indexação de substâncias no Current Abstracts of Chemistry e Index Chemicus.

## 3. SISTEMAS QUE UTILIZAM LÓGICA LINGÜÍSTICA

a. **NOMENCLATURA IUPAC**<sup>17</sup>. Este sistema evoluiu das convenções de Genebra (1892) e Liège (1932) e representou o primeiro grande esforço, em nível internacional, de se estabelecer uma nomenclatura geral para os compostos orgânicos. Dentre as suas inúmeras regras, a de número 3 diz que, obedecida a idéia geral da proposição, as várias sociedades devem procurar adaptá-la ao espírito de suas línguas. Esta foi, certamente, a proposta dos trabalhos de Rothe et al.<sup>1</sup>, Rosa<sup>4</sup>, Bicca de Alencastro & Wircker<sup>10</sup> etc.

Neste sistema de nomenclatura, os compostos possuem um nome que cresce de complexidade à medida que cresce

a complexidade da molécula, muito embora ele não busque ser do tipo "integral", admite unidades pluriatômicas como por exemplo, benzeno, naftaleno etc. É uma nomenclatura sistemática, baseada em uma lógica que usa um conjunto de regras consideradas convenientes por uma comissão internacional de químicos.

b. **A nomenclatura utilizada pelo CHEMICAL ABSTRACTS para os compostos orgânicos**<sup>18</sup>, que representa uma versão própria e consentida do sistema IUPAC com vistas à indexação destes compostos no sistema Chemical Abstracts – que é hoje a maior e mais completa fonte mundial de informação em química.

c. **NOMENCLATURA VULGAR.** A chamada Nomenclatura Comum, Vulgar ou Trivial, a primeira a ser usada para nomear os compostos orgânicos, é uma forma "espontânea" de se dar nomes a partir de um vínculo com o universo macroscópico do homem, sejam as suas fontes naturais (por exemplo "ácido salicílico" por ser um ácido extraído do salgueiro, "salix", em latim), a partir de uma idéia que os representem (por exemplo "cubano" – por ter a forma de cubo –, "catenano" – por ter a forma de cadeia, corrente) etc. Por adição ou substituição, são nomeados os seus derivados.

Pela sua própria natureza, esta forma de se nomearem os compostos incorpora de forma nítida, informações de história e de tradição da química – vale dizer de sua arte – mais do que uma técnica precisa como propõem as anteriores.

Talvez seja essa, justamente, a característica mais importante da nomenclatura vulgar: o fato dos compostos terem um "nome próprio", ou mesmo um "nome da família". Uma árvore de "parentescos" é então montada a partir do membro "mais antigo" – isto é, o primeiro a ser conhecido –, nomeado em "homenagem" à sua fonte de origem (p.ex. Nicotina, extraída da planta *Nicotiana tabacum*), a uma idéia concreta (o mencionado Cubano por ter a forma de um cubo) etc.

Em Geoquímica Orgânica, as famílias dos hopanos, lupanos, gamaceranos etc. representam a mais distinta casta dos marcadores biológicos. Em Fitoquímica é ainda muito comum os "descendentes" ganharem nomes próprios (o derivado metilado da Morfina, na hidroxila da posição 3, é denominado Codeína).

É comum que a nomenclatura vulgar busque auxílio nas regras da nomenclatura IUPAC para indicar modificações nos esqueletos básicos: des-A-femenos, hop-17,21-eno etc. Surge daí uma espécie de nomenclatura binária em que os compostos são nomeados em termos de famílias. Nela, o nome próprio da família vem acompanhado do nome do substituinte, devidamente indexado sobre a sua relação de parentesco (posição de substituição no esqueleto principal, estereoquímica etc.). Esta tendência de "hibridização" parece vir também do lado da nomenclatura IUPAC para moléculas complexas, como os esteróides, diterpenos etc., que usa, também, deste arranjo para designar as moléculas: estabelece uma série de esqueletos básicos – "Fundamental Carbocycles"<sup>19</sup> – como ponto de partida (gonanos, estra-

\* A abreviação WLN, comumente empregada para designar este sistema, advém de sua denominação em inglês "Wiswesser Line-Formula Chemical Notation".

nos, colestanos etc.) para estabelecer as famílias. Um conjunto de regras é então usado para descrever a posição de substituintes, estereoquímica etc. Mas, apesar deste “avanço” da nomenclatura IUPAC (em relação à proposta de nomenclatura integral) é ainda muito mais fácil se fazer referência à Cortisona (nome inicialmente comercial, hoje praticamente incorporado à nomenclatura vulgar) do que à 17,21-di-hidroxi-4-pregнено-3,11,20-triona (nomenclatura IUPAC).

Muitas críticas são feitas à nomenclatura vulgar. Uma delas talvez a mais séria — é que ela, por não ser sistemática, requer o aprendizado de um número grande de nomes (próprios) e, portanto, a existência de um dicionário que registre a estrutura para os diversos nomes dos compostos (ou famílias). Mas, — volte-se ao exemplo acima — se não há como se escrever a estrutura da Cortisona a partir do seu nome, da mesma forma o termo Pregнено exige a consulta à mencionada lista dos “esqueletos básicos” da série de esteróides. Esta dificuldade é real, mas não a ponto de ser mais importante do que o seu valor como simplificador na comunicação escrita e, principalmente, na oral.

A principal proposição dos Sistemas “avançados” de nomenclatura (MCA, Nodal, IUPAC) é a universalidade, isto é, atender a todos os compostos, a partir de primeiros princípios (elas seriam, também, “integrais”). Pode-se dizer que, de uma maneira geral, todos os sistemas mencionados funcionam bem com moléculas simples. À medida que a complexidade das moléculas cresce, cresce também a complexidade dos nomes e notações (integrais). É precisamente neste ponto — moléculas complexas — que um outro “avanço” na nomeação/notação dos compostos orgânicos se faz necessário.

Um sistema de nomenclatura tem muito a ver com um sistema de linguagem, que, por sua vez, tem muito a ver com o grupo de usuários. Desta forma, é perfeitamente razoável se esperar uma transformação natural da língua original em “dialetos”, — i.e. sub-sistemas próprios de nomenclatura — em função do seu uso (vejam-se, por exemplo, os nomes dados às famílias e indivíduos nas áreas de fármacos, defensivos agrícolas, psicotrópicos etc.).

A proposta da universalização da nomenclatura dos compostos químicos talvez se alinhe com a proposta do esperanto de ser uma língua universal. Mas veja-se que, apesar de todos os esforços de seus líderes, ela tem se mostrado ser um fracasso. Continuam prevalecendo as línguas regionais. E mais ainda, os dialetos. Por outro lado, pela razão precisa da existência destes dialetos é que existe a necessidade de uma língua universal de comunicação. Na sociedade atual, esta posição vem sendo ocupada pelo inglês. De forma semelhante, linguagens do tipo IUPAC, Nodal, procuram ser esta linguagem internacional de comunicação entre os químicos. Mas elas terão que conviver, pacificamente, e mesmo simbioticamente, com as línguas regionais da nomenclatura trivial. Conquanto as várias formas de se nomearem e representarem os compostos orgânicos possam ser encontradas na literatura química do presente, talvez caiba, para que se possa fazer

uma análise crítica dos mesmos, que se estabeleçam regras gerais — princípios, pode-se assim dizer — que sejam capazes de balisar as discussões feitas a respeito.

Uma discussão sobre “regras” deve se iniciar por lembrar as recomendações de Descartes<sup>20</sup> quando, no seu “Discurso sobre o Método”, disse que “...em lugar do grande número de preceitos de que a lógica é composta, acreditei que já me seriam bastante quatro, conquanto que tomasse a firme e constante a resolução de não deixar uma vez só de observá-los...”.

Na transposição destas idéias para o domínio da nomeação dos compostos orgânicos poder-se-ia dizer que, conquanto possa ser necessário um conjunto numeroso de regras para definir o modo de nomear a todos os compostos, é importante que se estabeleçam algumas poucas que sejam essenciais, e “...que se tome a firme resolução de não deixar uma só vez de observá-las...”

O capítulo da nomenclatura dos compostos químicos é fundamental ao ensino da química. Aos alunos, no entanto, ela é geralmente imposta sob a forma de um cotejo de regras e exercícios de fixação apresentados sem maiores preocupações com a sua racionalidade. E como tal, é recebido como um dos mais desinteressantes capítulos do curso.

Foi pensando principalmente nesta racionalidade, e seguindo os preceitos de Descartes, que o seguinte conjunto de princípios gerais foi estabelecido para ser o ponto de partida para o que será dito sobre a nomeação de substâncias orgânicas em geral e na língua portuguesa, em particular. Assim, o nome dado a um composto deve:

19) Servir como elemento ágil de comunicação — oral e escrita — vale dizer, de entendimento fácil entre as pessoas.

Deste objetivo advém que o nome dado a um composto deve ser simples, de tal forma que se possa facilmente incorporá-lo à linguagem do dia-a-dia e se possa reconhecer, de imediato, a espécie de que se está falando.

Neste ponto vale chamar a atenção para o papel relevante que a nomenclatura vulgar tem para a comunicação oral. Assim, o nome próprio, de uso corrente, pode ser visto, em relação às nomenclaturas integrais, como uma abreviação do seu nome (integral), uma espécie de “nome de guerra” ou de “apelido” para o composto, que visa precipuamente à comunicação. Veja-se, por exemplo, o caso do inseticida conhecido por DIELDRIN. Querer usar seu nome IUPAC (3,4,5,6,9,9,-hexacloro-1a,2,2a,3,6,6a,7,7a-octa-hidro-2,7,3,6,-dimetanonafto (2,3-bioxireno) como elemento de comunicação é o mesmo que se referir a D. Pedro I, numa conversa informal, como Pedro de Alcântara Francisco Antonio João Carlos Xavier de Paulo Miguel Rafael Joaquim José Gonzaga Pascoal Cipriano Serafim de Bragança e Bourbon, seu verdadeiro nome<sup>21</sup>.

29) Respeitar o vernáculo na sua forma mais simples e direta, valendo-se das regras da gramática da língua no seu modo mais usual.

Esta regra é uma extensão da anterior. O vernáculo nasce e cresce com o indivíduo e a ele se incorpora como parte integrante, indissolúvel e indispensável de sua existência. Cada palavra possui, para ele, um significado muito mais amplo do que a definição dada por um dicionário. É como

se um "super thesaurus" fosse sendo desenvolvido e armazenado ao longo de sua vida. Além disso, a estrutura gramatical da língua é também a sua estrutura de pensamento. Portanto, respeitar os termos e a estrutura da língua nos seus mínimos detalhes, é condição que deve atender qualquer nomenclatura que se proponha a ser um elemento corrente de comunicação. Sem dúvida, a regra 3 da IUPAC, mencionada, reconhece a importância deste item.

O inglês é coerente quando diz:

ACETALDEHYDE	ETHYL ACETATE
ACETAMIDE	ETHYL ALCOHOL
ACETANILIDE	ETHYL AMINE
ACETIC ACID	ETHYL BROMIDE
ACETIC ANHYDRIDE	ETHYL ETHER
ACETONITRILE	ETHYL MERCAPTAN
	ETHYL METHYL KETONE

Em português estes nomes são usados, atualmente, da seguinte forma:

ACETALDEÍDO ou	ACETATO DE ETILA
ALDEÍDO ACÉTICO	ÁLCOOL ETÍLICO
ACETANILIDA	BROMETO DE ETILA
ÁCIDO ACÉTICO	ÉTER ETÍLICO
ANIDRIDO ACÉTICO	ETIL MERCAPTANA
ACETONITRILA	ETIL METIL CETONA

isto é, uns adotam a construção "normal" da língua portuguesa (substantivo seguido do adjetivo) como, por exemplo, em Ácido Acético ou Éter Etílico, enquanto outros optam pela construção da língua inglesa, de onde os termos foram mais adotados do que propriamente traduzidos (ex. acetamida, etilamina etc.). A rigor, "etilamina" deveria soar tão estranho aos ouvidos dos químicos brasileiros quanto "acético ácido" ou "etil álcool". O hábito do uso dos termos etilamina, acetamida etc. nos torna permissivos para com a estrutura da língua. Seria conveniente, pois, que uma linguagem coerente fosse estabelecida. Assim, melhor do que as formas indicadas na lista acima, seriam as da lista que se segue:

ALDEÍDO ACÉTICO	ÉSTER ACÉTICO DE
AMIDA ACÉTICA	ETILA***
ANILIDA ACÉTICA	ÁLCOOL ETÍLICO
ÁCIDO ACÉTICO	AMINA ETÍLICA
ANIDRIDO ACÉTICO	BROMETO DE ETILA****
NITRILA ACÉTICA	ÉTER ETÍLICO
	MERCAPTANA ETÍLICA
	CETONA ETIL METÍLICA

Estas formas, além de explicitarem as funções químicas para uma eventual busca automática (não é indispensável mas, certamente, facilita), criam um sistema coerente, harmonioso, e, por que não dizer, "portuguesamente" eufônico de se nomearem estes compostos. O Quadro I reúne alguns casos mais marcantes desta forma de nomeação de compostos orgânicos em língua portuguesa.

39) Ser biunívoca com relação a uma dada estrutura, isto é, a uma dada estrutura deve corresponder um só nome, ao mesmo tempo que para um dado nome só uma estrutura deve poder ser escrita. Devem, também, poder ser escritas sempre de um mesmo modo, por qualquer pessoa, para que ele possa ser utilizado como elemento significativo de informação/comunicação. Neste aspecto, as nomenclaturas que utilizam a lógica lingüística, particularmente as que buscam ser "integrais", deixam muito a desejar: é prática comum quando se faz uma busca no Chemical Abstracts sobre um dado composto que se inicie pelo índice de fórmulas moleculares, já que no índice de assuntos o nome do composto pode vir escrito de maneiras diversas. O próprio Chemical Abstracts ao estabelecer o Número de Registro para os compostos químicos reconhece este fato.

As formas de representação que utilizam tanto a lógica matemática quanto a de arquivamento não permitem ambiguidade e são próprias para a recuperação automática. Não se prestam, no entanto, à comunicação, mormente à oral. Já os sistemas de nomenclatura que se utilizam da lógica lingüística são os mais próprios para a comunicação. Mas nem sempre uma mesma estrutura é nomeada de um mesmo modo por pessoas diferentes. E a diversidade de modos cresce à medida que cresce a complexidade da molécula. Será razoável se ter que recorrer a "especialistas em nomenclatura" sempre que se tiver que nomear uma molécula mais complicada?

40) Permitir a recuperação automática (uso de computadores) de informações nele contidas.

Este é, sem dúvida, um dos pontos nevrálgicos de qualquer sistema atual de notação/nomenclatura. A chamada "era da informática", com o uso generalizado de computadores para aquisição e ordenação rápida de informações, é uma realidade que "chegou para ficar"; qualquer sistema de nomenclatura que a ela não se adapte, é para ser descartado por obsoleto que já se tornou.

Este item é atendido pelas notações WISWESSER (16), SMILES (22) etc. introduzidas muito posteriormente à

\*\*\* Em favor de se explicitar o termo *éster* pode-se argumentar que as funções  $R-O^{\ominus}Metal^{\oplus}$  e  $R-O-R'$  têm nomes distintos: alcóxila e éter, respectivamente, bem como seus compostos:  $CH_3ONa = metóxido de sódio$  e  $CH_3-O-CH_3 = éter (di) metílico$ . As funções  $R-COO^{\ominus}Metal^{\oplus}$  e  $R-O-R'$  também têm nomes distintos: sal e éster. No entanto, usa-se para os compostos correspondentes a mesma denominação (da parte "ácida"):  $CH_3COONa = acetato de sódio$  e  $CH_3COOC_2H_5 = acetato de etila$ . Foi buscando dar maior coerência a estas formas de nomear grupos funcionais que a expressão *éster acético de etila* (o mesmo que éter etílico do ácido acético, apenas numa construção mais condensada) foi usada para o segundo, deixando à forma iônica o sufixo *ato*, próprio para os sais.

\*\*\*\* Pelas razões discutidas para o caso do éster, o termo brometo deveria ser reservado para os compostos em que o bromo estivesse na forma de um ânion de um sal.

**Quadro I.** Alguns grupos funcionais (mais comuns) da química orgânica e sua nomeação em compostos orgânicos.

GRUPAMENTO FUNCIONAL	EXEMPLO	
	FÓRMULA	NOME
ACETAL	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OCH}_3)_2$	ACETAL ACÉTICO DE DIMETILA
ÁCIDO CARBOXÍLICO	$\text{CH}_3\text{COOH}$	ÁCIDO ACÉTICO
ÁLCOOL	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	ÁLCOOL PROPÍLICO
ALDEÍDO	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$	ALDEÍDO PROPIONICO
AMIDA	$\text{CH}_3\text{CONH}_2$	AMIDA ACÉTICA
AMINA	$(n\text{-C}_4\text{H}_9)_2\text{NH}$	AMINA DIBUTÍLICA
ANIDRIDO	$(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO})_2\text{O}$	ANIDRIDO PROPIONICO
CETONA	$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_3$	CETONA ETIL METÍLICA
ÉSTER	$\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$	ÉSTER ACÉTICO DE METILA
GLICOL	$\text{CH}_2\text{OHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	GLICOL-1,4 BUTÍLICO
HIDRAZINA	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NHNH}$	HIDRAZINA FENÍLICA
IMIDA	$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{NH}$	IMIDA ACÉTICA
NITRILA	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{N}$	NITRILA PROPIONICA
NITRO	$\text{BrC}_6\text{H}_4\text{NO}_2 (1,4)$	BROMO-4 NITRO BENZENO
SULFONA	$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{SO}_2$	SULFONA DIFENÍLICA
SULFÓXIDO	$\text{CH}_3\text{SOCH}_3$	SULFÓXIDO DE DIMETILA
TIOÉTER	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S-CH}_2\text{CH}_3$	TIOÉTER ETÍLICO (DIETÍLICO)
TIOL/MERCAPTANA	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-SH}$	TIOL BUTÍLICO/MERCAPTANA BUTÍLICA

nomenclatura IUPAC\*\*\*\*\* e outras. É bom lembrar neste ponto que o nome de um composto químico, além da qualidade de ser um elemento de comunicação (oral e escrita) é também uma forma de notação linear.

Talvez a característica mais importante a ser atribuída às notações lineares associadas ao uso de computadores seja a de articular informações sobre compostos químicos através dos chamados Bancos de Dados.

Banco de Dados representam, hoje, um capítulo-chave na utilização da informação para a Química. Obter informações sobre um dado composto — ponto de fusão, espectros de massa, métodos de síntese, referências bibliográficas etc. — assim como “recuperar” compostos com uma certa propriedade — por exemplo, os ácidos halogenados que tenham um ponto de fusão na faixa 135-138°C ou as nitrilas que apresentem absorção no infravermelho a 1032-

1035  $\text{cm}^{-1}$  ou ainda os compostos que apresentem um átomo de nitrogênio terciário ligado a um grupo metila, um outro grupo alifático qualquer e um grupo aromático — já se tomaram atividades triviais do profissional da química.

Neste caso, os sistemas de notação linear desempenham um papel imprescindível não só pela biunicidade composto-representação como pelas informações inerentes que oferecem (elementos químicos, grupamentos funcionais, cadeias hidrocarbônicas).

A notação Wiswesser é, sem dúvida, um sistema de extrema utilidade para uso em computadores. Ela permite que, diretamente, na forma de um banco de dados possam ser recuperados os compostos que contenham um(a) mesmo(a)

1. elemento
2. grupamento funcional
3. cadeia hidrocarbônica

Neste sistema de notação os grupamentos funcionais não se apresentam, no entanto, explícitos para recuperação, i.e. eles têm que ser “compostos” a partir dos símbolos dos elementos e ligações, próprias do sistema. Uma variante da representação Wiswesser utiliza uma abreviatura (de três letras) para o nome dos grupamentos funcionais e cadeias hidrocarbônicas\*\*\*\*\*.

A recuperação de compostos/propriedades por grupamentos funcionais ou por cadeias hidrocarbônicas torna-se óbvia quando da utilização de qualquer sistema de banco de dados que utilize esta notação.

Esta variante proposta com vistas a simplificar (ou diri-

\*\*\*\*\* Cabe aqui um pequeno comentário a uma das críticas de um dos consultores que opinaram sobre este artigo, que defende o prevailecimento da nomenclatura IUPAC sobre outras: os sistemas de nomenclatura dos compostos mudam e se adaptam às necessidades. Não fosse assim, a própria IUPAC não manteria uma Comissão Permanente de Nomenclatura que, quase continuamente, discute o seu próprio sistema visando adaptá-lo a fatos novos, aperfeiçoando-o, portanto. O crescimento permanente da complexidade dos compostos, associado à necessidade de tratá-las por computadores, faz antever uma grande reforma no modo de melhor adequar a nomenclatura de compostos orgânicos (complexos) às necessidades já presentes do presente.

\*\*\*\*\* Uma descrição ampla e detalhada desta variante do sistema Wiswesser será motivo de publicação futura.

gir, talvez, mais a gosto e hábito do químico) a notação Wiswesser tem, para com esta, uma relação semelhante à que a nomenclatura trivial "iupactizada" tem para com a nomenclatura IUPAC, isto é, "reestrutura" a notação/nome para um nível mais próximo do usuário, vale dizer mais afastado dos primeiros princípios.

59) As regras devem ser sempre as mais simples que puderem ser. Tanto quanto possível, deve-se buscar o óbvio.

Uma das conseqüências deste raciocínio, é que todos os sinais e notações que se tomem supérfluos devem ser eliminados (excesso de hífen, vírgulas etc.). Por outro lado, todas as informações relevantes devem estar presentes na notação. Pressuposições (implícitas) devem ser reduzidas apenas às de senso comum.

Tome-se, por exemplo, a forma em uso de nomeação do composto

2,4-dinitro-5-cloro-tolueno

em português.

Que diferença faria (i.e. que informação a mais ou a menos se teria) se os hífen fossem substituídos por espaços em branco? Com esta modificação o nome seria escrito como:

2,4 dinitro 5 cloro tolueno

Esta grafia relaciona as partes do nome do mesmo modo que o nome hifenado (a menos do relacionamento com as palavras da frase que o antecede ou sucede). Conclui-se que o átomo de cloro está ligado na posição 5 do núcleo do tolueno porque, primeiro, a construção do nome começa por um algarismo: conseqüentemente, a posição de substituição precede o grupo substituinte. Segundo, porque aos números 2,4 sucede o termo dinitro, mostrando que às duas posições de substituição correspondem dois grupos nitro. Entretanto, esta indicação dupla é redundante: seria possível se terem dois grupos em uma só posição (no núcleo aromático)? ou, seria possível se ter um só grupo em duas posições? a resposta é não em ambos os casos. Portanto, expressão "2,4 di" é redundante: bastaria que se dissesse

2,4 nitro 5 cloro tolueno

Neste nome, no entanto, os números estão soltos, o que certamente pode acarretar confusão sobre a relação substituinte-posição: é bom, portanto, que haja um atrelamento entre o nome do substituinte e a posição que ele ocupa e a melhor maneira de fazê-lo é através de um hífen! Voltamos à maneira inicial de escrever o nome? Não: apenas os hífen indispensáveis ao estabelecimento da relação substituinte-posição é que serão mantidos.

Uma outra pergunta relacionada a substituintes e posições pode ser levantada: o que é mais importante para aquele que lê a fórmula, o nome do substituinte ou a posição em que ele se encontra no núcleo aromático? A resposta a esta pergunta é que vai indicar a maneira "natural" de se nomear o composto, se será o nome do substituinte seguido da posição de substituição, ou o con-

trário.

Conquanto a resposta a esta pergunta não seja óbvia, é de consenso mais amplo que o substantivo seja o grupo, restando à posição a função de adjetivá-lo. Isto parece ser assim na língua inglesa, já que lá, o(s) algarismo(s) que indicam a posição precedem o nome do grupo. A seguir este raciocínio, em português a indicação de posição deverá suceder o nome do grupo, maneira, aliás, usada na nomenclatura de compostos orgânicos em língua francesa. Nestas condições o nome ficaria

nitro-2,4 cloro-5 tolueno

Finalmente, há que se estabelecer que os substituintes deverão se suceder em ordem alfabética. Esta é também uma regra geral: a ordenação alfabética deve estar presente sempre que possível e razoável for. O nome que atende a todas as considerações feitas seria, portanto,

cloro-5 nitro-2,4 tolueno

O aumento crescente do número de compostos com estruturas complexas e a velocidade com que se necessitam de informações sobre eles no mundo moderno, aliado ao fato da necessidade da comunicação entre os usuários destes compostos, indicam que a utilização dos sistemas de notação/nomeação dos compostos orgânicos deve se concentrar nos próximos anos no sentido de se

1. utilizar extensivamente o Número de Registro sempre que for necessário uma busca na literatura das informações relativas a um dado composto.
2. utilizar extensivamente sistemas de notação lineares (tipo Wiswesser) para busca e relacionamento de compostos constantes de bancos de dados (uso de computadores).
3. buscar uma evolução dos sistemas de lógica linguística (comum e IUPAC) para uso na comunicação escrita e oral na direção de uma confluência que utilize mais os nomes próprios dos compostos (e/ou famílias), modulados pelas regras IUPAC.

## REFERÊNCIAS

- 1 Rothe, O.; Difini, A.; Lacaz, P.S. *Eng. Quím.* (1955) 7 (6), 13.
- 2 Rosa, M.C. *Rev. Soc. Brasil. Quím.* (1947) 16, 35.
- 3 Rosa, M.C. (1961) 42, 69.
- 4 Rosa, M.C. *Nomenclatura em química orgânica; publicação póstuma.* Rio de Janeiro, Esc. Nac. Quím., (1964) 45 p.
- 5 Míngoia, Q.; Nazario, G.; Campos, H.V. *Nomenclatura de química orgânica para a nova edição da farmacopéia brasileira.* *Arc. Biol.* (1953) p. 6-10.
- 6 Mano, E.B. & Araujo, A.A.; Terminologia relativa a polímeros em língua portuguesa. *Reunião Anu. Div. Quím. Org. Bioquím., Sec. Reg. Guanabara, Ass. Brasil. Quím.,* 6., Rio de Janeiro, 1964.

- <sup>7</sup> Rangel, J.C.P.; *Da necessidade de uniformização da nomenclatura em química orgânica na língua portuguesa*. Rio de Janeiro, 1965.
- <sup>8</sup> Bicca de Alencastro, R.; *Quím. Nova* (1982) 5, 67.
- <sup>9</sup> Bicca de Alencastro, R. & Wircker, L.F. *Quím. Nova* (1984) 7, 150.
- <sup>10</sup> Bicca de Alencastro, R. & Wircker, L.F. *Nomenclatura da química orgânica; uma versão das regras da IUPAC (contendo a nomenclatura dos hidrocarbonetos, heterociclos e compostos funcionalizados contendo oxigênio, nitrogênio e halogênios)*. Rio de Janeiro, Inst. Quím., UFRJ, (1984).  
Veja também Bicca de Alencastro, R. & Mano, E.; *Nomenclatura de Compostos Orgânicos*, Rio de Janeiro, Ed. Guanabara, (1987) 272p.
- <sup>11</sup> Spialter, L.; *J. Amer. Chem. Soc.* (1963) 85, 2012.
- <sup>12</sup> Spialter, L.; *J. Chem. Doc.* (1964) 4, 261.
- <sup>13</sup> Spialter, L.; *J. Chem. Doc.* (1964) 4, 269.
- <sup>14</sup> Lozac'h, N.; Goodson, A.L.; Powell, W.H.; *Angew Chem. Int. Ed. Eng.* (1979) 18, 887.
- <sup>15</sup> CASRegistry System. In: *CHEMICAL abstracts index guide: appendix II*. Columbus, Ohio, 1984. p. 89I; Dittmar, P.G.; Stobaugh, R.E.; Watson, C.E. *The Chemical Abstracts Service Chemical Registry System*; I. General design. *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* (1976) 16, 111.
- <sup>16</sup> Vollmer, J.J.; *J. Chem. Ed.* (1986) 60, 192. Veja também Woodburn, H.M. *Using the Chemical Literature*, Marcel Dekker, Inc. N.Y. 1974.
- <sup>17</sup> International Union of Pure and Applied Chemistry. *Nomenclature of organic chemistry; definite rules for section C; characteristic groups containing carbon, hydrogen, oxygen nitrogen, halogen, sulfur, selenium, and/or tellurium*. London, Butterworths, (1965). 260p.
- <sup>18</sup> Chemical substance index names. In: *Chemical abstracts index guide, appendix IV*. Columbus, Ohio, 1984. p. 1011-2311.
- <sup>19</sup> Definitive Rules for Nomenclature of Steroids. *Pure Appl. Chem.* (1972) 31, 283.
- <sup>20</sup> Descartes, B. *Discours de la Méthode*, Lyde, 1637. Trad. Port. de Cruz Costa, J.; Edição de Ouro, Livraria José Olympio Editora S/A., p. 67.
- <sup>21</sup> Grande Enciclopédia Delta Larrouse. Rio de Janeiro, Ed. Delta, 1971, v. 11, p. 5199.
- <sup>22</sup> "Simplified Molecular Input Line Entry System", Medchem Group, Pomona College, Claremont, Ca., U.S.A.

## DIVULGAÇÃO

### CÉLULAS A COMBUSTÍVEL: UMA ALTERNATIVA PROMISSORA PARA A GERAÇÃO DE ELETRICIDADE

Edson A. Ticianelli e Ernesto R. Gonzalez

*Departamento de Química e Física Molecular, Instituto de Física e Química de São Carlos  
Universidade de São Paulo; C. Postal 369; 13560 - São Carlos (SP)*

Recebido em 10/11/88

#### ABSTRACT

In this paper it is presented a brief review of the state-of-the-art of several fuel cell technologies, namely, phosphoric acid, alkaline, solid polymer electrolyte, molten carbonate and solid oxide. General aspects related to the commercialization of fuel cells, possible application in Brazil, and a program and budget for research and development are discussed in terms of the Brazilian energy scenario and economy.

#### 1. INTRODUÇÃO

As células a combustível são sistemas eletroquímicos capazes de converter a energia química de uma grande variedade de combustíveis diretamente em energia elétrica, sem as limitações de eficiência impostas pelo ciclo de Carnot inerente às máquinas térmicas. No estágio atual de desenvolvimento, o único combustível que permite obter densidades de corrente elétrica adequadas é o Hidrogênio, que pode ser produzido "in situ" através da reforma a vapor