

Guía Breve para a Nomenclatura en Química Orgánica

K.-H. Hellwich (Alemania), R. M. Hartshorn (Nueva Zelanda), A. Yerin (Rusia), T. Damhus (Dinamarca), A. T. Hutton (Sudáfrica). C/e: organic.nomenclature@iupac.org Organismo patrocinador: División de Nomenclatura Química e Representación Estructural da IUPAC

Traducido e adaptado por: Manuel R. Bermejo (España), Ana María González Noya (España), José Manuel Seco (España). C/e: ana.gonzalez.noya@usc.es

1 INTRODUCCIÓN

A adopción universal dunha nomenclatura concordada é unha ferramenta clave para a comunicación eficiente nas ciencias químicas, na industria e nas regulacións asociadas coa importación/exportación ou a saúde e a seguridade. A Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC nas súas siglas inglesas) ofrece recomendacións sobre moitos aspectos da nomenclatura.¹ Os fundamentos da nomenclatura orgánica resúmense aquí, acompañados de documentos sobre a nomenclatura de química inorgánica² e polímeros,³ con enlaces aos documentos orixinais. Un resumo xeral da nomenclatura química pódese encontrar en *Principles of Chemical Nomenclature*.⁴ Unha descrición exhaustiva pódese atopar en *Nomenclature of Organic Chemistry*, coloquialmente coñecido como o *Libro Azul*,⁵ así como en publicacións relacionadas para os compostos inorgánicos (o *Libro Vermello*),⁶ e polímeros (o *Libro Púrpura*).⁷

Débase sinalar que moitos compostos poden ter nomes non-sistemáticos ou semisistemáticos e que as regras da IUPAC tamén permiten dar máis dun nome sistemático en moitos casos. Algúns nomes tradicionais (por exemplo estireno, urea) tamén se usan coa nomenclatura sistemática. A nova edición do *Libro Azul*⁵ incorpora unha xeira de criterios xerárquicos para elixir o nome individual preferido a efectos de regulación (*Preferred IUPAC Name*, ou PIN).

2 NOMENCLATURA SUBSTITUTIVA

A **nomenclatura substitutiva (ou de substitución)** é o método principal para nomear os compostos químicos orgánicos. Úsase principalmente para os compostos de carbono e dos elementos dos grupos 13-17. Con propósitos de nomenclatura, un composto químico trátase como a combinación dun composto proxenitor (Sección 5) e grupos (funcionais) característicos, un dos cales se denomina grupo característico principal (Sección 4). Un nome sistemático baséase no nome do composto proxenitor de maior xerarquía (Sección 6) no que a substitución dos átomos de hidróxeno se representa nun sufixo para o grupo ou grupos característicos principais, prefixos que representan aos grupos característicos de menor xerarquía e outros grupos substituíntes, e localizadores que especifican as súas posicións. Os nomes creados seguindo a nomenclatura substitutiva poden tamén incluír fragmentos nomeados de acordo con outros tipos de nomenclatura ou operacións. Por exemplo, as operacións de adición e subtracción (Sección 5.4) realízanse principalmente para definir o estado de hidroxenación, namentres que unha operación de substitución define un cambio de (na maioría dos casos) átomos de carbono por heteroátomos.

2.1 Componentes dos nomes substitutivos sistemáticos

As compoñentes máis comúns dun nome químico substitutivo ilústranse con referencia á estrutura química mostrada na Táboa 1, xunto co seu nome sistemático e os compoñentes de dito nome.

Os localizadores indican a posición dos substituíntes ou ben outras características estruturais. Xeralmente, colócanse antes da parte do nome que indica a característica estrutural correspondente. Úsanse tres tipos de marcas inclusivas, na orde de anidación {{()}}, cando sexa necesario indicar que partes dun nome van xuntas.

Para citar a versión orixinal en inglés, por favor, use: IUPAC, *Pure Appl. Chem.* 2020, <https://doi.org/10.1515/pac-2019-0104>. Permítese a publicación deste documento por calquera medio baixo a condición de que sexa completa e inalterada. Copyright © IUPAC & De Gruyter 2020.

¹ Dispoñible gratuitamente en: (a) <https://www.degruyter.com/view/f/pac/>;

(b) <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/>.

² R. M. Hartshorn *et al.*, Brief Guide to the Nomenclature of Inorganic Chemistry, *Pure Appl. Chem.* **87**(9–10), 1039–1049 (2015).

³ R. C. Hiorns *et al.*, A Brief Guide to Polymer Nomenclature, *Pure Appl. Chem.* **84**(10), 2167–2169 (2012).

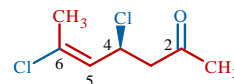
⁴ G. J. Leigh (Ed.), *Principles of Chemical Nomenclature – A Guide to IUPAC Recommendations, 2011 Edition*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-1-84973-007-5.

⁵ H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.), *Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-182-4; corrección, modificación e extensión: <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html>.

⁶ N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton (Eds.), *Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005*, RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 0-85404-438-8.

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

Táboa 1. Componentes do nome substitutivo (4*S*,5*E*)-4,6-diclorohept-5-en-2-ona para



hept(a)	composto proxenitor (heptano)	ona	sufixo para o grupo característico principal
en(o)	terminación de insaturación	cloro	prefixo substituínte
di	prefixo multiplicador	<i>S E</i>	estéreo- descritores
2 4 5 6	localizadores	()	marcas inclusivas

Os prefixos multiplicadores (Táboa 2) úsanse cando máis dun fragmento de idéntico tipo se atopa nunha estrutura. A clase de prefixo multiplicador que se emprega depende da complexidade do fragmento correspondente – p. ex. triclora, pero, pola contra, tris(clorometil).

Táboa 2. Prefixos multiplicadores para as entidades simples e complexas

Nº	Simple	Complexa	Nº	Simple	Complexa
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis

3 CREACIÓN DOS NOMES SISTEMÁTICOS

A formación dun nome sistemático require de diversas etapas, que se deben seguir (cando sexan aplicables) na orde seguinte:

- Determinar o grupo característico principal que se ha citar como sufixo (véxase a Sección 4).
- Determinar o composto proxenitor de maior xerarquía entre aqueles compoñentes estruturais unidos ao grupo característico principal (véxanse as Seccións 5 e 6).
- Nomear o hidruro proxenitor e especificar calquera insaturación (Sección 5).
- Combinar o nome do hidruro proxenitor co sufixo para o grupo característico principal (Sección 4).
- Identificar os substituíntes e ordenar os correspondentes prefixos segundo orde alfabética.
- Inserir os prefixos multiplicadores, sen cambiar a orde xa establecida, e engadir os localizadores.
- Determinar os centros quirais e outras unidades estereoxénicas, tales como dobres enlaces e engadir os correspondentes estereodescritores.

4 GRUPOS CARACTERÍSTICOS. Sufixos e prefixos

A presenza dun grupo característico (ou funcional) indícase cun prefixo ou cun sufixo unido ao nome do composto proxenitor. Os nomes dos grupos característicos comúns figuran na Táboa 3, en orde de xerarquía decrecente. O de maior xerarquía, o grupo característico principal, cítase como sufixo, namentres que todos os outros grupos se citan como prefixos. Nótese que para fins de nomenclatura, os enlaces múltiples C–C non se consideran grupos característicos (Sección 5.4).

Táboa 3. Orde xerárquica para os grupos característicos

Clase	Fórmula*	Sufixo	Prefixo
carboxilatos	–COO [–] –(C)OO [–]	-carboxilato -oato	carboxilato
ácidos carboxílicos	–COOH –(C)OOH	ácido -carboxílico ácido -oico	carboxi
ésteres	–COOR –(C)OOR	-carboxilato de (R)** -oato de (R)**	(R)oxicarbonil
haluros de ácido	–COX –(C)OX	haluro de -carbonilo haluro de -oilo	halocarbonil
amidas	–CONH ₂ –(C)ONH ₂	-carboxamida -amida	carbamoil
nitrilos	–C≡N –(C)≡N	-carbonitrilo -nitrilo	ciano
aldehídos	–CHO –(C)HO	-carbaldehído -al	formil oxo
cetonas	=O	-ona	oxo
alcois	–OH	-ol	hidroxi
tioles	–SH	-tiol	sulfanil***
aminas	–NH ₂	-amina	amino
iminas	=NH	-imina	imino

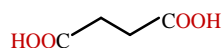
* Aquí –(C) indica que o átomo de carbono está incluído no nome do composto proxenitor.

** Aquí (R) significa que o grupo R se expresa como unha palabra separada.

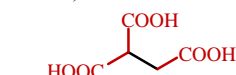
*** NOTA. O termo “mercaptop” xa non se acepta (pero aínda se usa polo CAS).



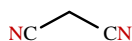
Dependendo do número e disposición dos grupos carbonados nomeados como sufixos, o átomo de carbono pode ser parte do composto proxenitor (p. ex. $-(C)OOH$, “ácido -oico”) ou pode ser tratado como grupo unido ao composto proxenitor (p. ex. $-COOH$, “ácido carboxílico”).



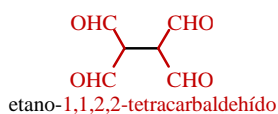
ácido butanodioico



ácido etano-1,1,2-tricarboxílico

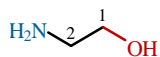


propanodinitrilo

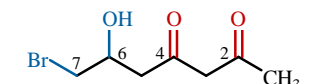


etano-1,1,2,2-tetracarbaldéido

Outros grupos característicos nun composto proxenitor representáanse cos prefixos correspondentes citados en orde alfabética (aquí **en azul**, onde R representa un grupo alquilo ou arilo), incluíndo tamén éteres ($-OR$), (R)oxi; sulfuros ($-SR$), (R)sulfanil; $-Br$, bromo; $-Cl$, cloro; $-F$, fluoro; $-I$, iodo; e $-NO_2$, nitro.



2-aminoetan-1-ol



7-bromo-6-hidroxiheptano-2,4-diona

5 COMPOSTOS PROXENITORES, HIDRUROS PROXENITORES

Na nomenclatura substitutiva empréganse varios tipos de compostos proxenitores. Os compostos proxenitores sen grupos característicos denomínanse hidruros proxenitores. Estes hidruros pódense clasificar segundo sexan cadeas ou ciclos, e poden conter átomos de carbono e/ou heteroátomos. Os compostos proxenitores con aneis poden ser monocíclicos, policíclicos con ponte (aneis que comparten máis de dous átomos), policíclicos condensados (aneis que comparten dous átomos veciños) ou policíclicos espiránicos (aneis que comparten un só átomo). Os compostos proxenitores máis complexos inclúen sistemas fusionados con pontes, asociación de aneis, ciclofanos e fulerenos. A numeración dos átomos dun composto proxenitor defínese mediante regras propias para cada tipo de composto proxenitor. A partir de aquí, aplícanse as regras descritas na Sección 7.

5.1 Hidruros proxenitores acíclicos

Os nomes das cadeas de carbono saturadas (alcanos) compóñense do termo numérico simple que indica o número de átomos de carbono (Táboa 2, coa “a” elidida) xunto coa terminación “ano” (véxase a Táboa 4), coa excepción dos catro primeiros alcanos: metano, CH_4 ; etano, CH_3CH_3 ; propano, $CH_3CH_2CH_3$; butano, $CH_3[CH_2]_2CH_3$.

Táboa 4. Nomes para algúns alcanos lineais

$CH_3[CH_2]_3CH_3$	$CH_3[CH_2]_7CH_3$	$CH_3[CH_2]_{18}CH_3$
pentano	nonano	icosano
$CH_3[CH_2]_4CH_3$	$CH_3[CH_2]_{16}CH_3$	$CH_3[CH_2]_{20}CH_3$
hexano	octadecano	docosano

5.2 Hidruros proxenitores monocíclicos

Os nomes dos hidrocarburos saturados monocíclicos (cicloalcanos) están compostos polo prefixo “ciclo” e o nome do alcano correspondente.



ciclopropano



ciclobutano



ciclohexano



ciclododeceno

Consérvanse varios nomes non sistemáticos para aneis comúns, por exemplo, benceno e os seguintes heterociclos.



benceno



piridina



piperidina



pirazina



furan

Os nomes sistemáticos para aneis monocíclicos que conteñen heteroátomos constrúense de acordo co sistema de Hantzsch-Widman (HW) (aneis de 3 a 10 membros) ou a nomenclatura de substitución (aneis máis grandes).^{4,5} Ambos sistemas usan os prefixos “a” que se mostran na Táboa 5, nos que a xerarquía diminúe de esquerda a dereita na primeira fila e logo na segunda fila.

O sistema H-W combina os prefixos “a” da Táboa 5 en orde decrecente de xerarquía coas terminacións, no sistema H-W chamados talos, que indican o tamaño e a saturación do anel (Táboa 6).

Táboa 5. Prefixos “a” seleccionados para os sistemas H-W e de substitución

O	oxa	S	tia	N	aza	P	fosfa
As	arsa	Si	sil	Sn	estanna	B	bora

Engádense os localizadores axeitados para describir a situación das substitucións no anel e a vogal “a” elídese cando vai seguida dunha vogal. Se hai máis de 10 átomos no anel, úsase a nomenclatura de substitución, na que os prefixos “a” se enumeran novamente en orde decrecente de xerarquía, cos localizadores correspondentes, diante do nome do composto proxenitor. A numeración dos átomos explícase na Sección 7.

Táboa 6. Terminacións no sistema de Hantzsch-Widman

Tamaño do anel	Insaturado	Saturado
3	irino*/ireno	iridino/irano**
4	eto/etano**	etidino/etano**
5	ol	olidino/olano**
6	ino/ino/inino***	ano/inano/inano***
7	epino	epano

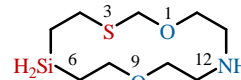
* Para aneis con N como único(s) heteroátomo(s). ** Para aneis con/sen N como heteroátomo(s). *** Sendo O,S / N,Si,Sn / P,As,B o heteroátomo citado ao final, respectivamente.



1,3-dioxano



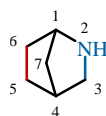
1,2-oxazol



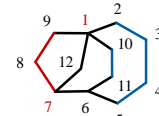
1,9-dioxa-3-tia-12-aza-6-silaciclotetradecano

5.3 Hidruros proxenitores policíclicos

Os nomes dos sistemas policíclicos tipo ponte baséanse no nome do alcano co mesmo número de átomos de carbono, precedido por un indicador do número de ciclos presentes e dun descriptor de ponte que define os tamaños dos diversos aneis; este descriptor proporciona o número de átomos do esqueleto en cada unha das pontes que conectan as cabezas de ponte e ven dado por números arábigos citados en orde numérica descendente, separados por puntos e incluídos entre corchetes. A numeración comeza nunha cabeza de ponte e recorre os aneis en orde (de maior a menor). A nomenclatura de substitución (véxase a Sección 5.2) emprégase para nomear os heterociclos relacionados.

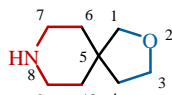


2-azabiciclo[2.2.1]heptano

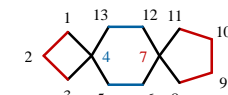


triciclo[4.3.2.1.7]dodeceno

Os nomes dos sistemas policíclicos espiránicos, nos que hai un só átomo en común nos aneis, inclúen o número de unións espiránicas, un descriptor de ponte e o nome do alcano co mesmo número de átomos de carbono. Como na sección anterior, os heterociclos relacionados noméanse de acordo coa nomenclatura de substitución (véxase a Sección 5.2).

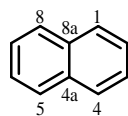


2-oxa-8-azaespiro[4.5]decano

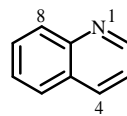


diespiro[3.2.4.7.2]trideceno

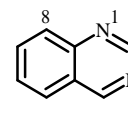
Os policiclos fusionados son sistemas cíclicos que teñen un enlace común para calquera par de aneis adxacentes.



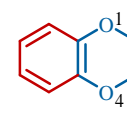
naftaleno



quinolina

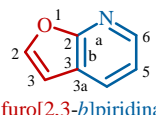


quinazolina



1,4-benzodioxino

Na nomenclatura sistemática de policiclos fusionados combínanse os nomes dos compoñentes e engádense un descriptor de fusión que indica como están conectados ditos compoñentes. Este proceso está máis alá do alcance desta guía (consulte a referencia 5 para obter máis detalles).



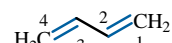
furo[2,3-b]piridina



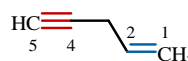
benzo[g]quinolina

5.4 Saturación e insaturación

O grao de insaturación dun composto en comparación co composto proxenitor saturado pódese indicar substituíndo a terminación “ano” polas terminacións “eno” e “ino” que definen a presenza de enlaces dobres e tripos, respectivamente, así como da adición de localizadores para mostrar as súas posicións.



buta-1,3-dieno



pent-1-en-4-ino

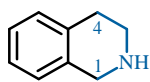


ciclohexa-1,3-dieno

A adición de hidróxeno aos hidruros proxenitores insaturados indícase coa inserción de prefixos “hidro” para indicar a saturación de dobres enlaces, de novo con localizadores para definir onde ocorre.

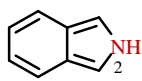


3,4-dihidropiridina

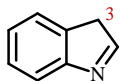


1,2,3,4-tetrahidroisoquinolina

Para algúns hidruros proxenitores insaturados, as posicións saturadas especificáanse usando a convención de *indicación do hidróxeno*.



2H-indol



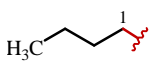
3H-indol



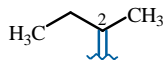
3,6-dihidro-2H-pirano

5.5 Grupos substituíntes derivados de hidruros proxenitores

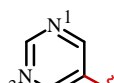
Nos casos nos que un grupo derivado dun hidruro proxenitor sexa un substituínte doutro composto proxenitor, o nome do substituínte créase mediante a adición dos sufixos "il" ou "ilideno" ao nome do hidruro proxenitor, cos localizadores correspondentes que indican a posición da unión. As posicións das unións expresadas polos sufixos "il" ou "ilideno" teñen prioridade fronte a calquera outro grupo característico (consulte a Sección 4, Táboa 3).



butil



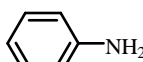
butan-2-ilideno



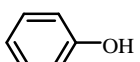
pirimidin-5-il

5.6 Compostos proxenitores funcionais

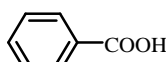
A combinación dun hidruro proxenitor cun grupo funcional pode formar un composto proxenitor funcional que se nomea como unha única entidade. Tales nomes utilízanse como nomes sistemáticos soamente se expresan tanto ao composto proxenitor como ao grupo característico de maior xerarquía do composto considerado, p. ex. 4-cloroanilina, pero, pola contra, ácido 4-aminobenzoico (non 4-carboxianilina nin ácido anilino-4-carboxílico).



anilina



fenol



ácido benzoico

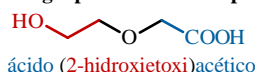


acetaldehído

6 XERARQUÍA DOS COMPOSTOS PROXENITORES

O nome sistemático baséase no nome do composto proxenitor de maior xerarquía, que se elixe aplicando os seguintes criterios na orde que se describe a continuación e se mostran na Figura 1, ata que se tome unha decisión. Para consultar o conxunto completo de criterios, véxase a referencia 8. Nos seguintes exemplos, o composto proxenitor de maior xerarquía móstrase en azul, e indícase a razón clave no texto adxacente.

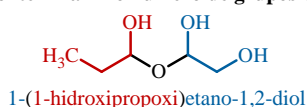
a. Contén o grupo característico principal



ácido (2-hidroxietoxi)acético

o ácido ten maior xerarquía que o alcohol

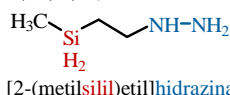
b. Contén máximo número de grupos característicos



1-(1-hidroxipropoxi)etano-1,2-diol

o composto proxenitor con dous grupos característicos ten maior xerarquía

c. O composto proxenitor está baseado nun elemento de maior xerarquía (N, P, Si, B, O, S, C)



[2-(metilsilil)etil]hidrazina

a hidrazina ten maior xerarquía que o silano (N ten maior xerarquía que Si)

d. Os ciclos teñen maior xerarquía que as cadeas cando se compoñen dos mesmos elementos



pentilciclobutano

o ciclobutano ten maior xerarquía que o pentano

NOTA 1: Logo deste criterio, tan só quedan aneis ou soo cadeas para unha elección posterior.

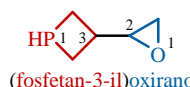
NOTA 2: En recomendacións anteriores, a xerarquía dependía do número de átomos.



Figura 1. Criterios para elixir o composto proxenitor de maior xerarquía

e. Criterios para sistemas cíclicos

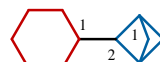
e.1. Contén o heteroátomo de maior xerarquía na orde N, O, S, P, Si, B.



(fosfetan-3-il)oxirano

o O-anel ten maior xerarquía que o P-anel

e.2. Contén maior número de aneis



2-ciclohexilbiciclo[1.1.1]pentano

o biciclo ten maior xerarquía que o monociclo

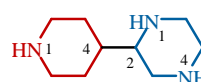
e.3. Contén maior número de átomos



ciclobutilciclopentano

o ciclopentano ten maior xerarquía que o ciclobutano

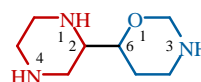
e.4. Contén maior número de heteroátomos



2-(piperidin-4-il)piperazina

a piperazina, ao ter dous heteroátomos, ten maior xerarquía que a piperidina

e.5. Contén máis heteroátomos de maior xerarquía

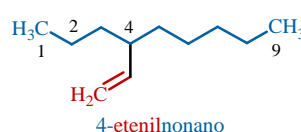


6-(piperazin-2-il)-1,3-oxazinano

o oxazinano, que contén O e N, ten maior xerarquía que a piperazina con dous átomos de N

f. Criterios para cadeas

f.1. Contén maior número de átomos



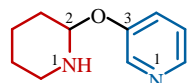
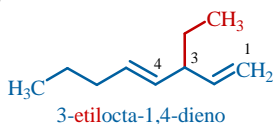
4-etenilnonano

unha cadea de nove átomos, ten maior xerarquía que unha de oito (inclusive se ten menos dobres enlaces)

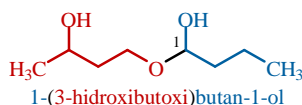
NOTA. En recomendacións anteriores, a insaturación tiña maior xerarquía que a lonxitude da cadea.

Os seguintes criterios aplícanse tanto ás cadeas como aos aneis:

g. Contén maior número de enlaces múltiples, e a continuación, dobres

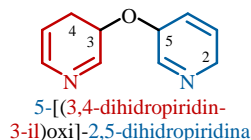
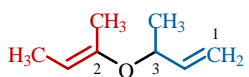


h. Presenta os localizadores máis baixos para os grupos de maior xerarquía

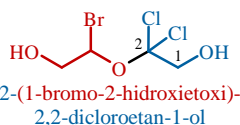


o butan-1-ol ten maior xerarquía que o butan-2-ol

i. Presenta localizadores máis baixos para insaturacións ou prefixos “hidro”

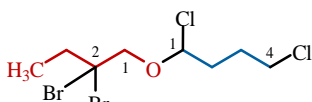


j. Contén o máximo número de substituíntes



o composto proxenitor con tres substituíntes ten maior xerarquía que o composto proxenitor con dous substituíntes

k. Presenta o conxunto máis baixo de localizadores para todos os substituíntes

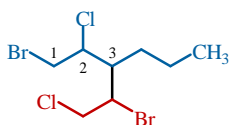


todos os localizadores do composto proxenitor están dispostos en orde crecente e comparados de un en un: 1,1,4 é menor que 1,2,2

1,4-dicloro-1-(2,2-dibromobutoxi)butano

NOTA. Non 2,2-dibromo-1-(1,4-diclorobutoxi)butano

l. Presenta localizadores de substituíntes máis baixos en orde de citación

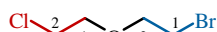


1,3,2 é máis baixo que 2,3,1

1-bromo-3-(1-bromo-2-cloroetil)-2-clorohexano

NOTA. Non 2-bromo-3-(2-bromo-1-cloroetil)-1-clorohexano

m. O nome do substituínte aparece antes segundo orde alfabética



bromo cítase antes que cloro

1-bromo-2-(2-cloroetoxi)etano

NOTA. Non 1-(2-bromoetoxi)-2-cloroetano

7 NUMERACIÓN DOS COMPOSTOS PROXENITORES

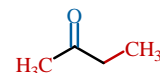
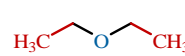
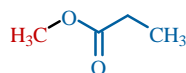
A numeración do composto proxenitor determínase segundo o tipo de composto e a continuación elíxese considerando todos os conxuntos posibles de localizadores e aplicando sucesivamente os seguintes criterios:

- Localizadores máis baixos para os heteroátomos;
- Localizadores máis baixos para o indicador de hidróxeno;
- Localizadores máis baixos para os grupos característicos principais;
- Localizadores máis baixos para “eno”, “ino” e prefixos “hidro”;
- Localizadores máis baixos para o conxunto de todos os substituíntes citados como prefixos;
- Localizadores máis baixos para os substituíntes en orde de citación.

	a. + b. Non se aplican; c. Comezar no C ao que está unido un OH; d. Numerar na dirección ao dobre enlace; e. Elixir a numeración que coloque ao CH ₃ na posición 5 e non na posición 6.
5-metilciclohex-2-eno-1,4-diol	
	a. - e. Non se aplican; f. Bromo cítase antes que cloro no nome e, polo tanto, recibe o localizador máis baixo.
1-bromo-4-clorobenceno (non 4-bromoclorobenceno)	
	A numeración correcta é extremadamente importante, porque un só localizador incorrecto fai imposible que o lector do nome poida atopar a estrutura correcta.

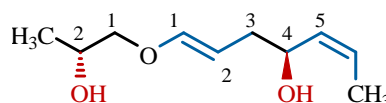
8 NOMENCLATURA DE CLASE FUNCIONAL

Os nomes de clase funcional (anteriormente, nomes radicofuncionais) prefírense para os ésteres e os haluros de ácido. Para outras clases de compostos (p. ex. éteres, cetonas, sulfóxidos e sulfonas) aínda se empregan os nomes de clase funcional, se ben se prefíren os nomes substitutivos. Os nomes de clase funcional constan dun ou máis nomes de substituíntes, ordenados alfabeticamente e seguidos do nome do tipo de composto (separados con espazos ou coa preposición “de”). Polo tanto, CH₃C(O)O-CH₃ denomínase acetato de metilo, ClCH₂C(O)O-CH₃ é o cloroacetato de metilo, CH₃C(O)-Cl é o cloruro de acetilo, C₆H₅C(O)-Br é o bromuro de benzoílo, e (H₃C)₂SO₂ denomínase dimetil sulfona (ou sulfona dimetífica).



9 ESPECIFICACIÓN DA CONFIGURACIÓN DOS ESTEREOISÓMEROS

Os estereoisómeros diferéncianse entre si mediante estereodescritores citados nos nomes e asignados de acordo coas regras de Cahn-Ingold-Prelog (CIP).^{9,10} Os descritores máis comúns son os que designan a configuración absoluta dos centros estereoxénicos tetraédricos (*R/S*) e os que designan a configuración de dobres enlaces (*E/Z*). Os localizadores engádense para definir as situacións dos centros estereoxénicos e o conxunto de descritores inclúese entre paréntese.

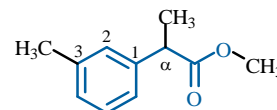
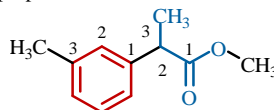


(1E,4S,5Z)-1-[(2R)-2-hidroxi)propoxi]hepta-1,5-dien-4-ol

En casos especiais útzanse outros estereodescritores (p. ex. *cis/trans*, *M/P*, *C/A*). Os descritores sen cursiva α/β e *D/L* (versaletas) úsanse comunmente e só para produtos naturais, aminoácidos e carbohidratos.

10 NOMENCLATURA DO CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE (CAS)

O CAS mantén un rexistro de substancias químicas recompiladas das publicacións.¹¹ No sistema CAS, os compostos noméanse utilizando métodos similares, pero non idénticos, aos da IUPAC. A diferenza máis destacable é o uso dos “CA Index Names”, os cales se citan no índice nunha orde especial inversa que se deseñou para a creación de índices alfabéticos de nomes químicos (NOTA. Recoméndase non alterar esta nomenclatura con traducións a outros idiomas pois pérdese o valor orixinal do sistema). O CAS utiliza tamén a nomenclatura conxuntiva, na que os compostos proxenitores combínanse para formar un composto proxenitor novo maior. No exemplo, o nome proxenitor conxuntivo é o ácido bencenoacético (nome substitutivo correspondente: ácido fenilacético), namentres que o nome substitutivo recomendado pola IUPAC para este exemplo baséase no composto proxenitor de cadea máis longa: ácido propanoico.



(1) (2)

Nome IUPAC:

2-(3-metil)fenil)propanoato de metilo (1)

Nome CA:

α ,3-dimetilbencenoacetato de metilo (2)

(En inglés)

methyl α ,3-dimethylbenzeneacetate)

No índice inverso:

ácido bencenoacético, α ,3-dimetil-, éster de metilo

(En inglés:

benzeneacetic acid, α ,3-dimethyl-, methyl ester)

Outras diferenzas inclúen a posición dos localizadores e estereodescritores, así como algúns procedementos de nomenclatura específicos.

11 REPRESENTACIÓN GRÁFICA

As fórmulas estruturais dos compostos químicos orgánicos débúxanse xeralmente de acordo coa convención en zigzag como se ten ilustrado amplamente con anterioridade.¹² Nesta convención, todos os átomos de carbono (e os átomos de hidróxeno unidos a eles) unidos cando menos a outros dous átomos que non sexan hidróxeno representáanse pola intersección de dúas liñas que representan enlaces. Non se deben omitir os átomos de hidróxeno unidos a heteroátomos. Nestas representacións gráficas, cada extremo dunha liña, ángulo e intersección representa un átomo de carbono cos seus correspondentes hidróxenos. Utilízanse convencións especiais para representar a configuración dos centros estereoxénicos e os dobres enlaces.¹³

⁹ R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, Specification of Molecular Chirality, *Angew. Chem.* **78**, 413–447 (1966); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **5**, 385–415 y 511 (1966).

¹⁰ V. Prelog, G. Helmchen, Basic Principles of the CIP-System and Proposals for a Revision, *Angew. Chem.* **94**, 614–631 (1982); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **21**, 567–583 (1982).

¹¹ Chemical Abstracts Service, <https://www.cas.org>.

¹² J. Brecher *et al.*, Graphical representation standards for chemical structure diagrams, *Pure Appl. Chem.* **80**(2), 277–410 (2008).

¹³ J. Brecher *et al.*, Graphical representation of stereochemical configuration, *Pure Appl. Chem.* **78**(10), 1897–1970 (2006).