

A

La nomenclatura dei composti organici polifunzionali

Con oltre 37 milioni di composti organici già conosciuti e le molte migliaia in più che si creano quotidianamente, assegnare un nome a ciascun composto è un problema non facile. Parte del problema è dovuta alla pura complessità delle strutture organiche, ma parte dipende anche dal fatto che i nomi chimici hanno più di uno scopo. Per il Chemical Abstracts Service (CAS), che cataloga la letteratura chimica mondiale e ne fornisce l'indice, ogni composto deve avere soltanto un nome corretto. Sarebbe il caos se il CH_3Br venisse inserito metà delle volte sotto la «M» di metil bromuro e l'altra metà sotto la «B» di bromometano. Inoltre un nome CAS deve essere strettamente sistematico affinché possa essere assegnato e interpretato dai computer; i nomi comuni non sono consentiti.

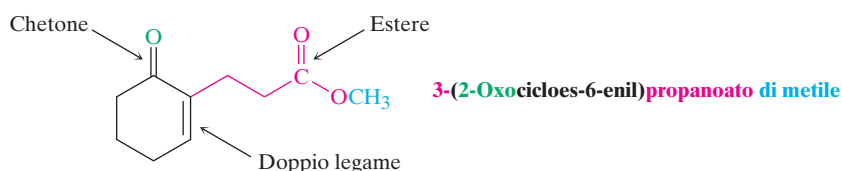
Le persone, però, hanno necessità differenti dai computer. Per i chimici, nelle loro comunicazioni orali e scritte, è meglio che un nome chimico sia facilmente pronunciabile e che sia il più possibile facile da assegnare e interpretare. Inoltre è opportuno che i nomi seguano i precedenti storici, anche se ciò implica che un composto molto conosciuto possa avere più di un nome. È facile comprendere che bromometano e metil bromuro si riferiscono entrambi a CH_3Br .

Come notato nel testo, i chimici usano prevalentemente il sistema di nomenclatura ideato e custodito dall'International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). Le regole per denominare i composti monofunzionali sono state esposte nel testo man mano sono stati introdotti i gruppi funzionali e un elenco di dove queste regole possono essere trovate è riportato nella tabella A.1.

Tabella A.1 Regole di nomenclatura dei gruppi funzionali

Gruppo funzionale	Paragrafo del testo	Gruppo funzionale	Paragrafo del testo
Anidridi	10.1	Composti aromatici	5.2
Alogenuri acilici	10.1	Acidi carbossilici	10.1
Alcoli	8.1	Cicloalcani	2.7
Aldeidi	9.2	Esteri	10.1
Alcani	2.3	Eteri	8.1
Alcheni	3.1	Chetoni	9.2
Alogenuri alchilici	7.1	Nitrili	10.1
Alchini	3.1	Fenoli	8.1
Ammidi	10.1	Solfuri	8.8
Ammine	12.1	Tioli	8.8

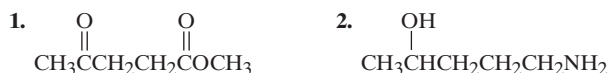
Assegnare il nome a un composto monofunzionale è abbastanza semplice, ma anche i chimici esperti spesso incontrano delle difficoltà quando si trovano di fronte a un composto polifunzionale complesso. Prendiamo il seguente composto, per esempio. Possiede tre gruppi funzionali, estere, chetone e C=C, come deve essere chiamato? Come estere col suffisso *-oato*, come chetone col suffisso *-one*, oppure come alchene col suffisso *-ene*? In realtà si chiama 3-(2-oxocicloes-6-enil)propanoato di metile.



Il nome di una molecola organica polifunzionale ha quattro parti: suffisso, nome base, prefissi e localizzatori, che devono essere identificati ed espressi nell'ordine e nel formato corretto. Vediamo ognuno dei quattro.

Parte 1 del nome. Il suffisso: la precedenza nei gruppi funzionali

Una molecola organica può contenere molti gruppi funzionali differenti, però, ai fini della nomenclatura, si deve scegliere un solo suffisso. Non è corretto usarne due. Pertanto il cheto estere **1** deve essere denominato o come chetone con il suffisso *-one*, o come estere, con il suffisso *-oato*; ma non può essere denominato *-onoato*. Analogamente l'ammino alcol **2** deve essere considerato o un alcol (*-olo*) o un'ammina (*-ammina*), ma non può essere denominato *-olammina* o *-amminolo*.



La sola eccezione a questa regola si ha per i composti che hanno doppi o tripli legami. Per esempio, l'acido insaturo $\text{H}_2\text{C}=\text{CHCH}_2\text{COOH}$ si chiama acido but-3-enoico e l'alcol acetilenico $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ si chiama pent-5-in-1-olo.

Con quale criterio va scelto il suffisso? I gruppi funzionali si dividono in due classi: **gruppi principali** e **gruppi subordinati**, come si può vedere nella tabella A.2. I gruppi principali sono quelli che possono essere citati come prefissi o come suffissi, mentre i gruppi subordinati possono essere citati solo come prefissi. È stato stabilito un ordine di precedenza all'interno dei gruppi principali: il suffisso da adottare per un dato composto si decide stabilendo qual è il gruppo che ha la priorità più alta. Dalla tabella A.2 si vede che, per esempio, il cheto estere **1** deve essere denominato come estere e non come chetone, perché il gruppo funzionale estereo ha priorità più alta del gruppo chetonico. Analogamente l'ammino alcol **2**, deve essere denominato come alcol e non

Tabella A.1 Classificazione dei gruppi funzionali^a

Gruppo funzionale	Nome come suffisso	Nome come prefisso
Gruppi principali		
Acidi carbossilici	acido -oico	carbossi
Anidridi	acido -carbossilico	—
	anidride -oica	
Esteri	anidride -carbossilica	alcossicarbonil
	-oato	
Tioesteri	-carbossilato	alchiltiocarbonil
	-tioato	
Alogenuri acilici	-carbotioato	alocarbonil
	-oil alogenuro	
Ammidi	-carbonil alogenuro	carbamoil
	-ammide	
Nitrili	-carbossammide	ciano
	-nitrile	
Aldeidi	-carbonitrile	oxo
	-ale	
Chetoni	-carbaldeide	oxo
	-one	
Alcoli	-olo	idrossi
Fenoli	-olo	idrossi
Tioli	-tiolo	mercapto
Ammine	-ammina	ammino
Immine	-immina	immino
Eteri	etere	alcossi
Solfuri	solfo	alchiltio
Disolfuri	disolfuro	—
Alcheni	-ene	—
Alchini	-ino	—
Alcani	-ano	—
Gruppi subordinati		
Azidi	—	azido
Alogenuri	—	alo
Nitro composti	—	nitro

^a I gruppi principali sono elencati in ordine di priorità decrescente; i gruppi subordinati non hanno ordine di priorità.

come ammina. Quindi il nome di **1** è 4-oxopentanoato di metile; quello di **2** è 5-amminopentan-2-olo. Qui di seguito riportiamo qualche altro esempio.



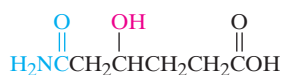
1. 4-Oxopentanoato di metile
(un estere con un gruppo chetonico)



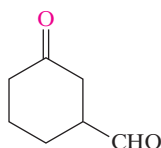
2. 5-Aminopentan-2-olo
(un alcol con un gruppo amminico)



3. 5-Metil-6-oxoesanoato di metile
(un estere con un gruppo aldeidico)



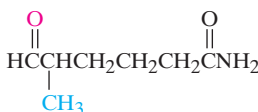
4. Acido 5-Carbamoil-4-idrossipentanoico
(un acido carbossilico con un gruppo ammidico e un gruppo alcolico)



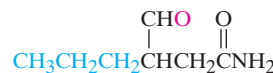
5. 3-Oxocicloesancarbaldeide
(un'aldeide con un gruppo chetonico)

Parte 2 del nome. Il nome base: scegliere la catena principale o l'anello

Il nome base di un composto organico polifunzionale di solito è facile da identificare. Se il gruppo a priorità più alta fa parte di una catena aperta, il nome base è quello della catena più lunga contenente il maggior numero di gruppi funzionali principali. Per esempio, i composti **6** e **7** sono ammidi aldeidiche isomere che, ai fini della nomenclatura, devono essere considerate ammidi piuttosto che aldeidi, secondo quanto stabilito nella tabella A.2. La catena più lunga del composto **6** ha sei atomi di carbonio e il composto viene, quindi, denominato 5-metil-6-oxo-esanammide. Anche il composto **7** ha una catena a sei atomi di carbonio, ma quella più lunga, contenente entrambi i gruppi funzionali principali, ha solo quattro atomi di carbonio. Il nome corretto del composto **7** è 4-oxo-3-propilbutanammide.



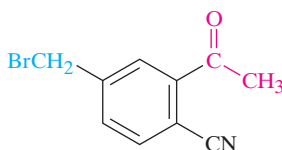
6. 5-Metil-6-Oxoesanammide



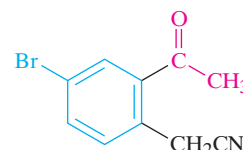
7. 4-Oxo-3-propilbutanammide

Se il gruppo a priorità più alta è legato a un anello, il nome base è quello del sistema ciclico. I composti **8** e **9**, per esempio, sono cheto nitrili isomeri ed entrambi, ai fini della nomenclatura, devono essere considerati dei nitrili, in accordo con la tabella A.2. Il composto **8** è un benzonitrile perché il gruppo funzionale $-CN$ è un sostituito dell'anello aromatico, ma il composto **9** è un acetone nitrile perché il gruppo funzionale $-CN$ si trova su una catena aperta. I nomi corretti sono 2-acetil-(4-bromometil)benzonitrile (**8**) e (2-acetil-4-bromofenil)acetone nitrile (**9**).

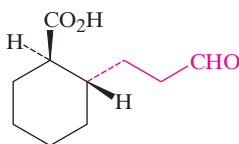
Come ulteriori esempi i composti **10** e **11** sono entrambi cheto acidi e devono essere denominati come acidi, ma il nome base di (**10**) è quello di un sistema ciclico (acido cicloesancarbossilico), mentre il nome base di (**11**) è quello di una catena aperta (acido propanoico). I nomi completi sono acido *trans*-2-(3-oxopropil)cicloesancarbossilico (**10**) e acido 3-(2-oxocicloesil)propanoico (**11**).



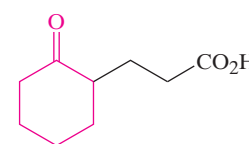
8. 2-Acetil-(4-bromometil)benzonitrile



9. (2-Acetil-4-bromofenil)acetone nitrile



10. Acido *trans*-2-(3-oxopropil)cicloesancarbossilico

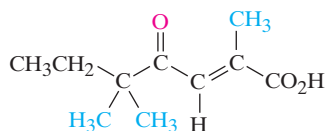


11. Acido 3-(2-oxocicloesil)propanoico

Parti 3 e 4 del nome. I prefissi e i localizzatori

Una volta stabiliti suffisso e nome base, bisogna identificare e numerare, o *localizzare*, tutti i sostituenti sulla catena base, o sull'anello. Tali sostituenti comprendono tutti i gruppi alchilici e tutti i gruppi funzionali, tranne quello riportato nel suffisso. Il composto **12**, per esempio, contiene tre gruppi funzionali diversi (il carbossile, il gruppo chetonico e il doppio legame). Dato che il carbossile è il gruppo a priorità più alta e che la catena più lunga contenente i gruppi funzionali ha sette atomi di carbonio, **12** è

un acido eptenoico. Inoltre sulla catena principale ci sono un sostituito chetonico (oxo) e tre gruppi metilici. La numerazione parte dall'estremità più vicina al gruppo funzionale a priorità più alta, dunque il nome del composto **12** è acido (*E*)-2,5,5-trimetil-4-oxoep-2-enoico. Per altri esempi di assegnazione dei prefissi e dei localizzatori si riguardino i composti che abbiamo già denominato.



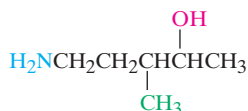
12. Acido (*E*)-2,5,5-trimetil-4-oxoep-2-enoico

Scrivere il nome

Dopo aver stabilito le diverse parti del nome, bisogna scrivere il nome per intero.

Si applicano alcune regole ulteriori:

1. Ordine dei prefissi. Una volta identificati i sostituenti, numerata la catena principale, assegnati i multipli appropriati, come *di-* e *tri-*, il nome va scritto con i sostituenti in ordine alfabetico, anziché in ordine numerico. I multipli *di-* e *tri-* non si considerano ai fini dell'ordine alfabetico, ma il prefisso *iso-* va considerato.

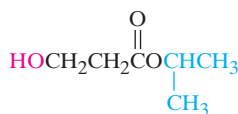


13. 5-Ammino-3-metilpentan-2-olo

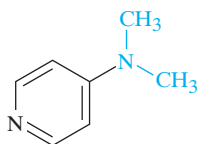
2. Uso dei trattini; nomi in una parola sola o in più parole. Come regola generale è necessario considerare se il nome base è di per sé un elemento o un composto. Se è un elemento o un composto il nome va scritto in un'unica parola; se non lo è il nome va scritto in più parole. Per esempio metilbenzene è scritto in un'unica parola perché il nome base, benzene, è esso stesso un composto. Dietil etere, invece, va scritto in due parole, perché il nome base, etere, è il nome di una classe e non di un composto. Di seguito vengono riportati alcuni altri esempi.



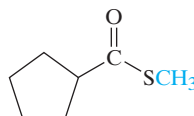
14. Dimetilmagnesio
(un'unica parola perché il magnesio è un elemento)



15. Isopropil 3-idrossipropanoato
(due parole perché «propanoato» non è un composto)

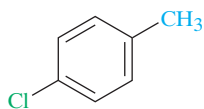
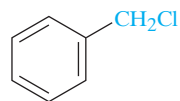


16. 4-(Dimetilammino)piridina
(un'unica parola perché la piridina è un composto)

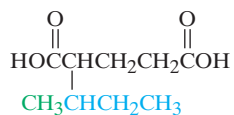


17. Metil ciclopentancarbotioato
(due parole perché «ciclopentancarbotioato» non è un composto)

3. Le parentesi. Si usano nel caso di sostituzioni complesse, al fine di evitare possibili ambiguità. Per esempio, con clorometilbenzene si vuole indicare un anello benzenico con due sostituenti; mentre con (clorometil)benzene si vuole indicare che è presente un solo sostituito complesso. Si noti che la parte tra parentesi non è separata dal resto del nome con un trattino.

18. *p*-Clorometilbenzene

19. (Clorometil)benzene



20. Acido 2-(1-metilpropil)pentandioico

Altre letture

Trattazioni più approfondite delle regole di nomenclatura dei composti organici si trovano online sul sito <http://www.abdlabs.com/iupac/nomenclature/> e nelle seguenti pubblicazioni in lingua inglese:

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