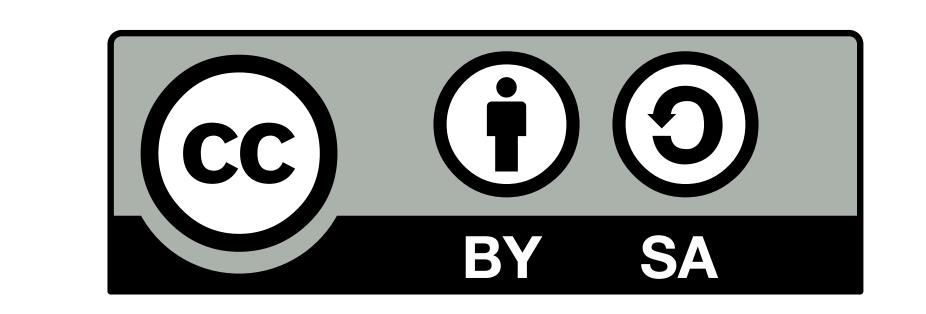


FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

Conceptos previos

Rodrigo Alcaraz de la Osa



Nomenclatura de sustitución

Es la **nomenclatura principal** para nombrar **compuestos orgánicos**, los cuales se tratan como una **combinación** de un **compuesto padre** y de **grupos f uncionales**, uno de los cuales se designa como el **grupo f uncional principal**. El grupo principal formará la **cadena principal**, mientras que el resto podrá formar parte de la cadena principal o formar **cadenas laterales**.

4,6-diclorohept-5-en-2-ona

hept(a)	cadena principal (heptano)	ona	sufijo para el grupo principal (cetona)
en(o)	insaturación	cloro	prefijo de sustituyente
di	prefijo multiplicador	2456	localizadores

Prefijos multiplicadores para entidades simples y complejas

Nº	SIMPLE	COMPLEJO	Nº	SIMPLE	COMPLEJO
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

Creación de nombres sistemáticos

La formación de un nombre sistemático requiere varios pasos:

- 1. **Determinar** el **grupo f uncional principal** que se nombrará mediante un **sufijo**.
- 2. Determinar la cadena principal, que ha de contener el grupo principal.
- 3. Nombrar la cadena principal y especificar cualquier insaturación (enlaces C=C y $C\equiv C$).
- 4. Combinar el nombre de la cadena principal con el sufijo del grupo f uncional principal.
- 5. Identificar los sustituyentes y ordenar sus prefijos alfabéticamente.
- 6. Insertar prefijos multiplicadores y localizadores.

Elección y numeración de la cadena principal

Elección

La cadena principal se elige aplicando los siguientes criterios:

- 1. Contiene el grupo funcional principal.
- 2. Contiene el mayor número de grupos funcionales.
- 3. Los sistemas de anillos son prioritarios frente a las cadenas.
- 4. Contiene más átomos.
- 5. Contiene más enlaces múltiples (dobles en caso de empate).
- 6. Contiene más sustituyentes.

Numeración

La cadena principal se numera aplicando los siguientes criterios:

- 1. Localizadores más bajos para heteroátomos (sustitutos de algún C en la cadena principal).
- 2. Localizador más bajo para el grupo funcional principal.
- 3. Localizadores más bajos para enlaces dobles y triples.
- 4. Localizadores más bajos como conjunto para todos los sustituyentes nombrados como prefijos.
- 5. Localizadores más bajos para sustituyentes en orden de mención (alfabético).

Grupos funcionales — sufijos y prefijos

Un **grupo f uncional** es un **átomo** o **grupo** de **átomos** dentro de una molécula que puede ser **responsable** de las **reacciones químicas características** de esa **molécula**. La siguiente tabla muestra la fórmula, sufijo (si es principal) y prefijo de cada uno de ellos, en orden decreciente de **prioridad**:

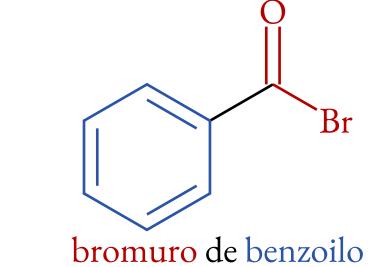
GRUPO FUNCIONAL	FÓRMULA* SUFIJO (PRINCIPA		L) PREFIJO (SUSTITUYENTE)			
Carboxilatos	-COO ⁻	-carboxilato -oato	carboxilato–			
Ácidos carboxílicos	-соон -(с)оон	ácidocarboxílico ácidooico	carboxi–			
Ésteres	-COOR -(C)OOR	carboxilato (de R) oato (de R)	(R)oxicarbonil–			
Haluros de ácido	-COX -(C)OX	haluro decarbonilo haluro deoilo	fluorocarbonil– clorocarbonil– bromocarbonil– yodocarbonil–			
Amidas	-CONH ₂ -(C)ONH ₂	-carboxamida -amida	carbamoil–			
Nitrilos	-C≡N -(C)≡N	-carbonitrilo -nitrilo	ciano–			
Aldehídos	-CНО -(С)НО	-carbaldehído -al	formil- oxo-			
Cetonas	=O	-ona	OXO-			
Alcoholes	-OH	-ol	hidroxi-			
Tioles	-SH	-tiol	sulfanil-			
Aminas	$-NH_2$	-amina	amino–			
Éteres**	-OR		(R)oxi-			
Haloalcanos**	-F -Cl -Br -I		fluoro- cloro- bromo- yodo-			
Nitrocompuestos**	$-NO_2$		nitro-			

^{*} Aquí -(C) indica que el átomo de carbono está implícito en la cadena principal.

Nomenclatura de clase funcional

También conocida como nomenclatura *radicofuncional*, es la **preferida** para **ésteres** y **haluros de ácido** (también utilizada para **éteres** y **cetonas**). Los nombres consisten en el **nombre** del **grupo principal** del compuesto seguido de la palabra *de* y el **nombre** del **sustituyente** al que va unido.

propanoato de metilo



Representación gráfica [zigzag]

cloruro de acetilo

Átomos distintos de C e H siempre se muestran.

Cada ángulo, cada intersección y cada extremo de una línea representa un átomo de carbono saturado de hidrógenos.

Compuestos padre (hidrocarburos)

Compuestos orgánicos formados únicamente por átomos de C e H. Distinguimos entre:

Alifáticos Pueden ser de cadena abierta (acíclicos) o cerrada (cíclicos).

Aromáticos Hidrocarburos cíclicos con enlaces simples y múltiples alternados. Ej.: benceno.

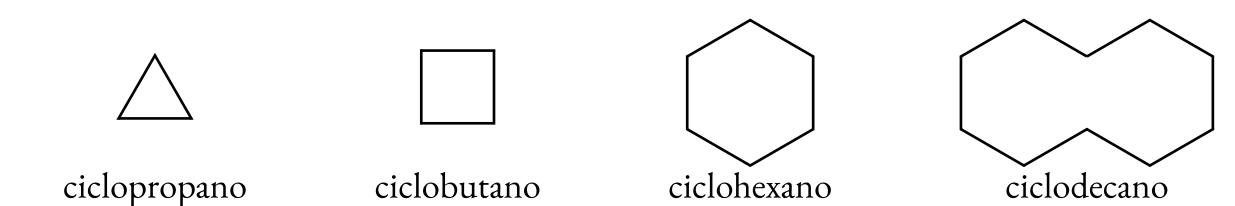
Alcanos (C-C)

Hidrocarburos en los que los **enlaces C–C** son todos **simples**. Se nombran con un **prefijo** que indica el número de átomos de C y la **terminación** —**ano**.

NÚMERO	DE ÁTOMOS DE C	1	2	3	4	5	6	7	8	• • •
	PREFIJO	met-	et–	prop-	but-	pent–	hex-	hept-	oct-	
H H—C—H H	H H H—C—C— H H	-H	I	H_3C	\sim_{C}	H_3	H_3	C		,CH ₃
metano	etano			proj	pano			but	ano	

En caso de ser **sustituyentes**, cambian la **terminación** –ano por *–il(o)*.

Cicloalcanos Se añade el **prefijo** ciclo— al nombre del hidrocarburo.



Alquenos (C=C) y alquinos (C=C)

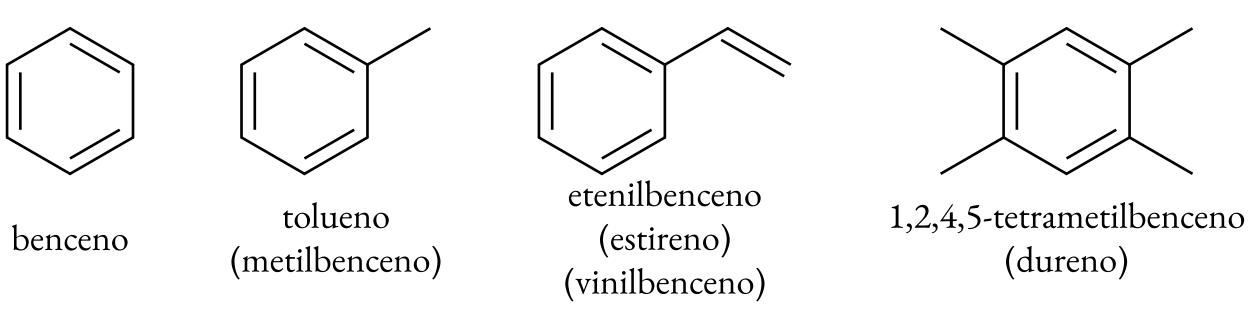
La presencia de **insaturaciones** —**enlaces dobles** (C=C) y **triples** (C=C)— se indica mediante las **terminaciones** —**eno** e —**ino**, respectivamente, y **localizadores** definiendo sus posiciones.

$$H_2C$$
 $\frac{3}{2}$
 CH_2
 HC
 $\frac{4}{2}$
 CH_2
 CH_2
 CH_2
 CH_2
 $CICIONE Dent-1-en-4-ino$
 $CICIONE CICIONE CICIONE$

En caso de ser **sustituyentes**, terminan en **-enil(o)** e **-inil(o)**, respectivamente.

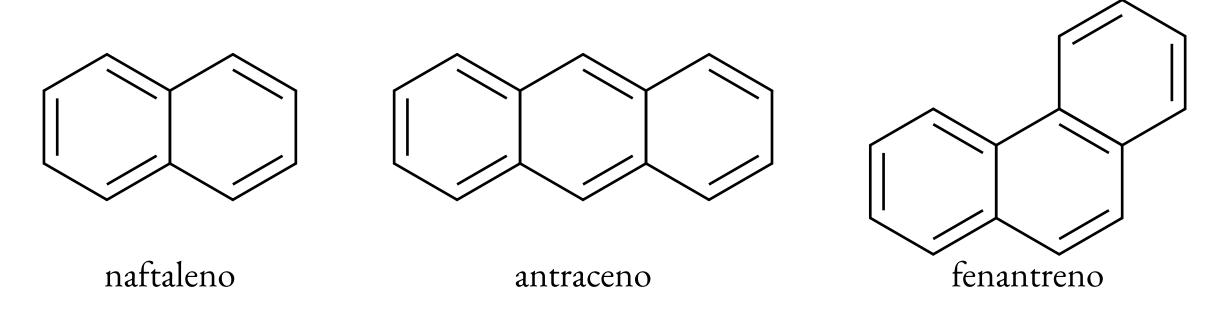
Aromáticos (arenos)

El **benceno**, C_6H_6 , es el hidrocarburo aromático de **referencia**.

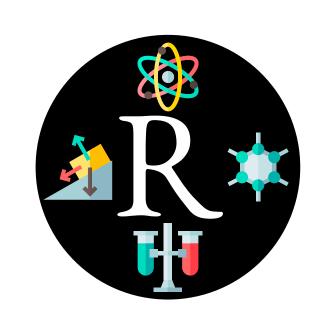


En caso de ser **sustituyente**, se denomina **fenil(o)**.

Arenos policíclicos con importancia en el estudio de **sistemas biológicos**



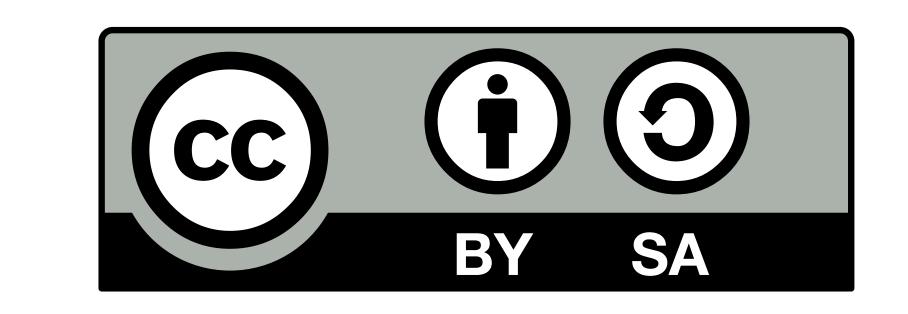
^{**} Los éteres, haloalcanos y nitrocompuestos se representan por prefijos en orden alfabético.



FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

Recomendaciones y nombres preferidos de la IUPAC de 2013

Rodrigo Alcaraz de la Osa



Funciones que contienen halógenos [F, Cl, Br o 1]

No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo** *fluoro*—, *cloro*—, *bromo*— o *yodo*—, según corresponda, al nombre del hidrocarburo.

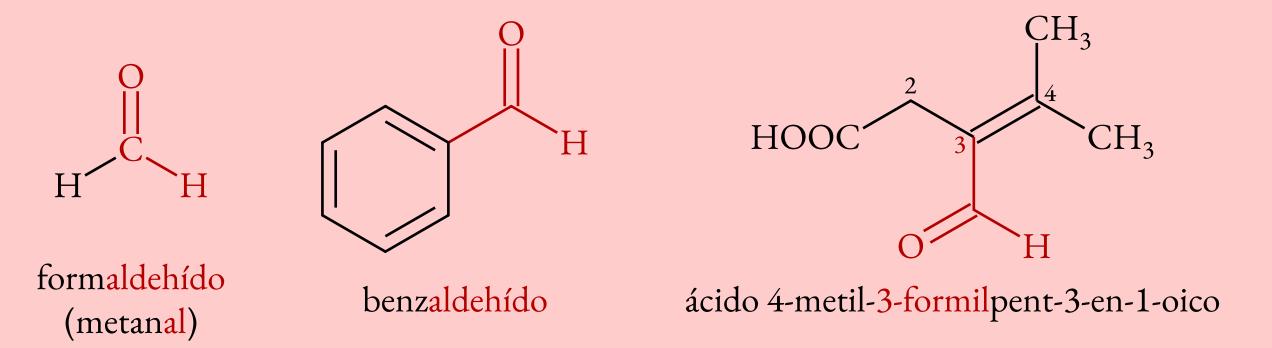
funciones que contienen oxígeno [O]

Alcoholes (-OH)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** *-ol* al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *bidroxi*-.

Aldehídos (-CHO)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** — *al* (o — *carbaldebído*) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *formil*— (u *oxo*—).



Cetonas (=0)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo –ona** al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo oxo**–.

Éteres (-OR)

No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo** (*R*)oxi— al nombre del hidrocarburo.

Funciones que contienen oxígeno (cont.)

Ácidos carboxílicos (-COOH)

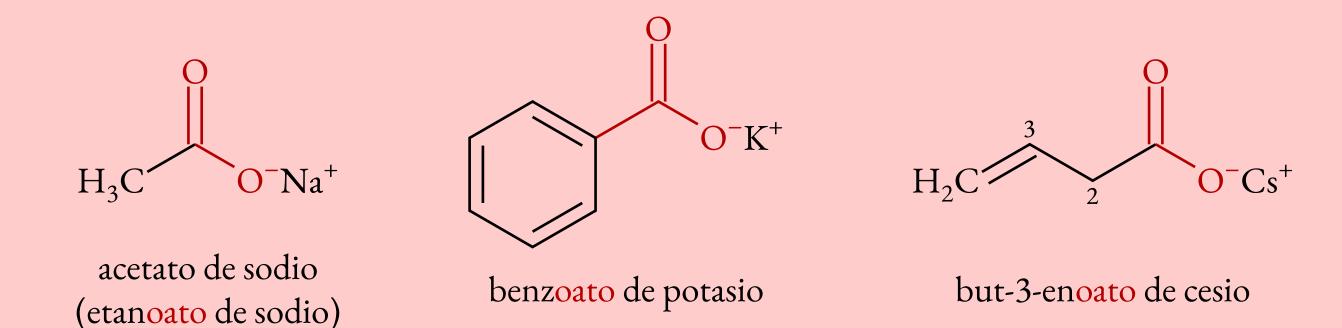
Son compuestos con un **grupo carboxilo**, -C(=O)OH. Si son el **grupo principal** se nombran comenzando por *ácido* y añadiendo el **sufijo** -oico (o -carboxílico) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** carboxi—. Ej.: **aminoácidos** y **ácidos grasos**.

Ésteres (-COOR)

Derivan de ácidos, en los que al menos un grupo hidroxi, —OH, se sustituye por un grupo —OR. Se utiliza la **nomenclatura** de **clase f uncional**, sustituyendo la **terminación** —oico del ácido por —*oato*, si son el **grupo principal**; en caso contrario se utiliza el **prefijo** (*R*)oxicarbonil—.

Carboxilatos (-COO-)

Son la base conjugada de un ácido carboxílico, siendo iones con carga negativa (aniones). Se utiliza la **nomenclatura** de **clase f uncional**, sustituyendo la **terminación** –oico del ácido por *—oato*, si son el **grupo principal**; en caso contrario se utiliza el **prefijo** *carboxilato*—.



Haluros de ácido (-COX)

Derivan de ácidos carboxílicos, sustituyendo el grupo hidroxi, —OH, por un haluro (F, Cl, Br o I). Se utiliza la **nomenclatura** de **clase f uncional**, comenzando por *haluro de* y sustituyendo la **terminación** –oico del ácido por *—oilo*, si son el **grupo principal**; en caso contrario se utiliza el **prefijo** *fluorocarbonil*—, *clorocarbonil*—, *bromocarbonil*— o *yodocarbonil*—, según corresponda.

Funciones que contienen nitrógeno (N)

Aminas (-NH₂)

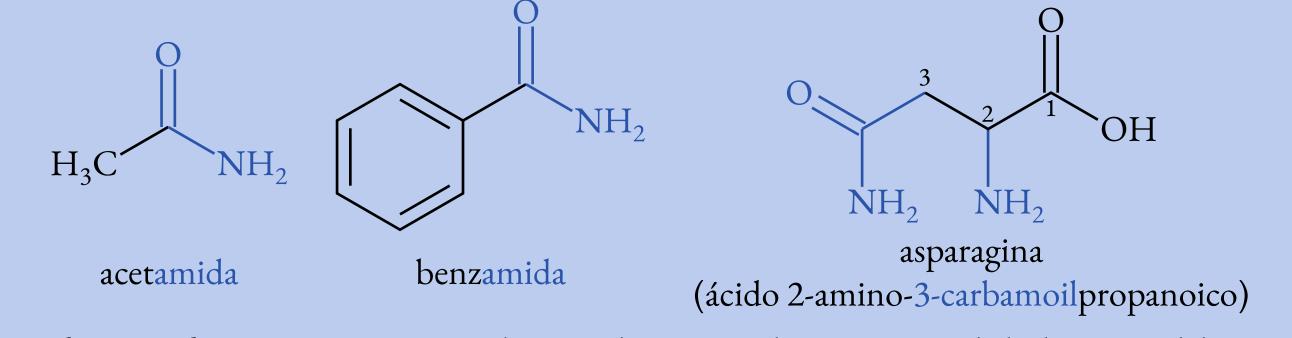
Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** *—amina* al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *amino*—.

Aminas secundarias y terciarias Cuando se reemplazan hidrógenos del grupo $-\mathrm{NH}_2$ por sustituyentes complejos se utiliza la letra N en vez de números localizadores.

$$H_3$$
C CH_3 H_3 C CH_3 N -metilmetanamina N -fenilanilina N , N -dimetilmetanamina

Amidas (-CONH₂)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** — *amida* (o — *carboxamida*) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *carbamoil*—.



Amidas secundarias y terciarias Igual que en las aminas, la sustitución de hidrógenos del grupo –CONH₂ se denota por la letra N en vez de números localizadores.

Nitrilos (−C≡N)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** *—nitrilo* (o *—carbonitrilo*) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *ciano*—.



Nitrocompuestos (-NO₂)

No pueden ser nunca el grupo principal. Se nombran añadiendo el **prefijo** nitro-.

