

FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

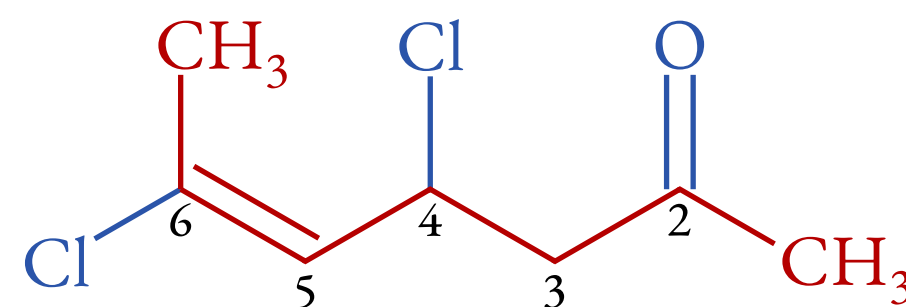
Conceptos previos

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 funcionales**, uno de los cuales se designa como el **grupo funcional 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	2 4 5 6	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 funcional 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≡C).
4. **Combinar** el **nombre** de la **cadena principal** con el **sufijo** del **grupo funcional 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 funcional** 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**:

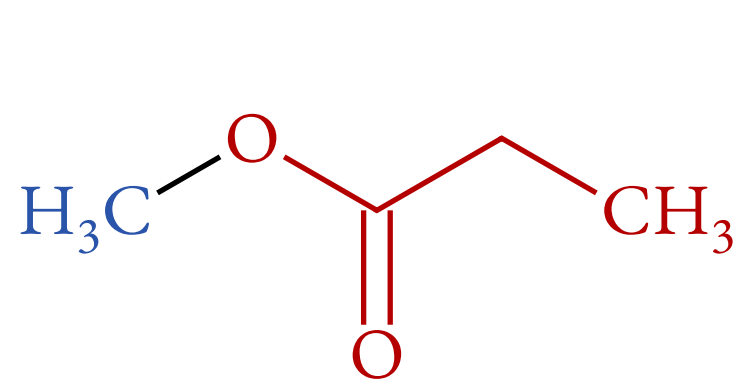
GRUPO FUNCIONAL	FÓRMULA*	SUFIJO (PRINCIPAL)	PREFIJO (SUSTITUYENTE)
Carboxilatos	–COO [–] –(C)OO [–]	–carboxilato –oato	carboxilato–
Ácidos carboxílicos	–COOH –(C)OOH	ácido ...carboxílico ácido ...oico	carboxi–
Ésteres	–COOR –(C)OOR	...carboxilato (de R) ...oato (de R)	(R)oxycarbonil–
Haluros de ácido	–COX –(C)OX	haluro de ...carbonilo haluro de ...oilo	fluorocarbonil– clorocarbonil– bromocarbonil– yodocarbonil–
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–
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.

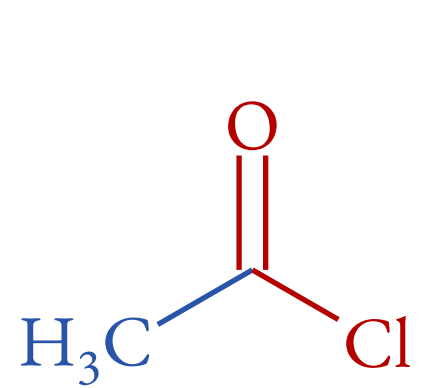
** Los éteres, haloalcanos y nitrocompuestos se representan por prefijos en orden alfabético.

Nomenclatura de clase funcional

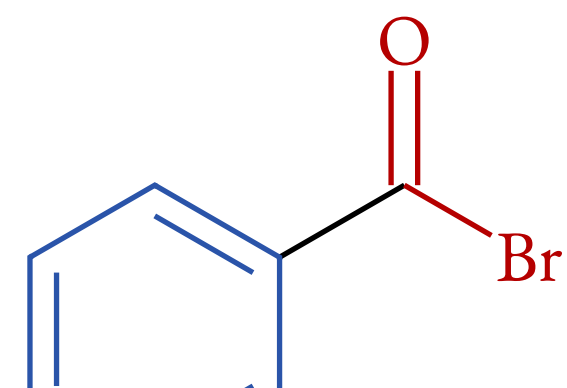
También conocida como nomenclatura **radicofuncional**, es la **preferida** para **ésteres** y **haluros de ácido** (también utilizada para **éteres** y **cetonas**). Los nombres consisten en el **nombre** del **grupo principal** del compuesto seguido de la palabra **de** y el **nombre** del **sustituyente**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



propanoato de metilo

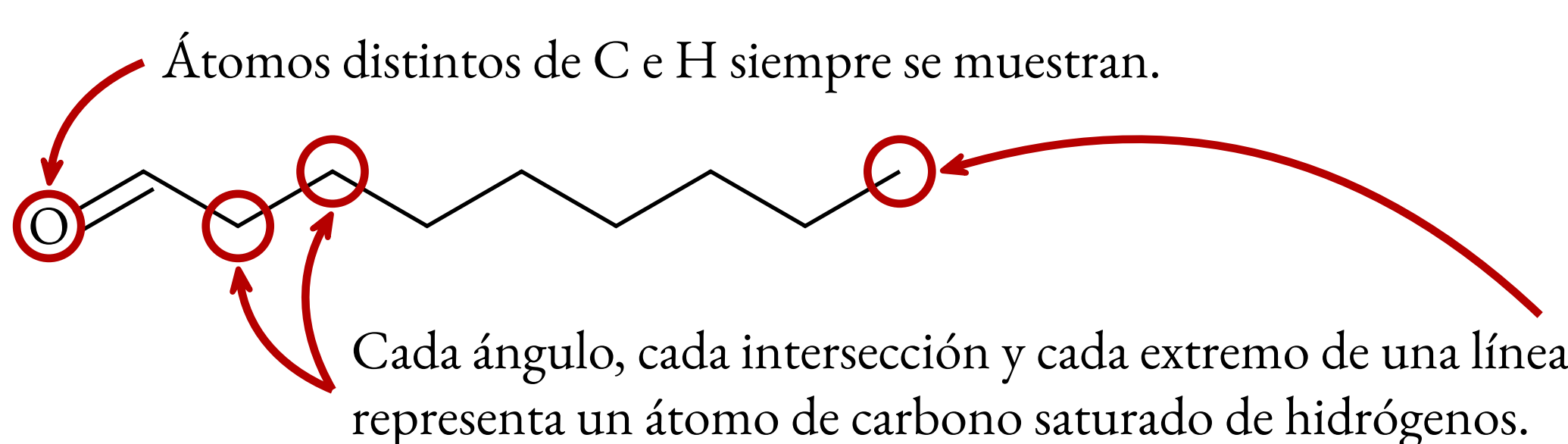


cloruro de acetilo



bromuro de benzoilo

Representación gráfica (zigzag)



Compuestos padre (hidrocarburos)

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

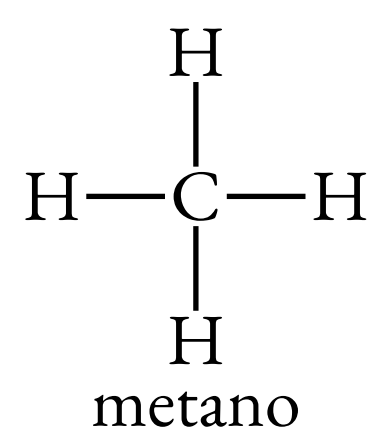
Alifáticos Pueden ser de **cadena abierta** (acíclicos) o **cerrada** (cíclicos).

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

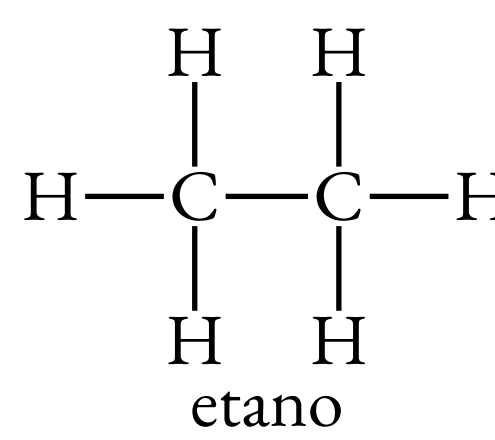
Alcanos (C–C)

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**.

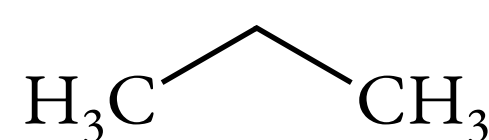
NÚMERO DE ÁTOMOS DE C	1	2	3	4	5	6	7	8	...
PREFIJO	met–	et–	prop–	but–	pent(a)–	hex(a)–	hept(a)–	oct(a)–	...



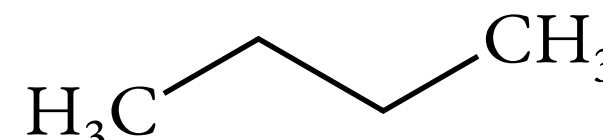
metano



etano



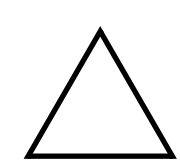
propano



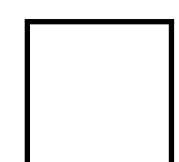
butano

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

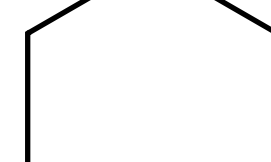
Cicloalcanos Se añade el **prefijo ciclo–** al nombre del hidrocarburo.



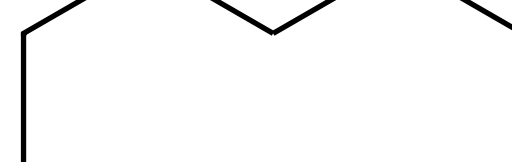
ciclopropano



ciclobutano



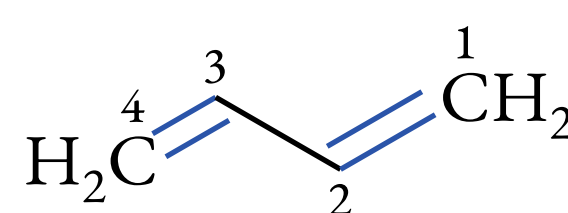
ciclohexano



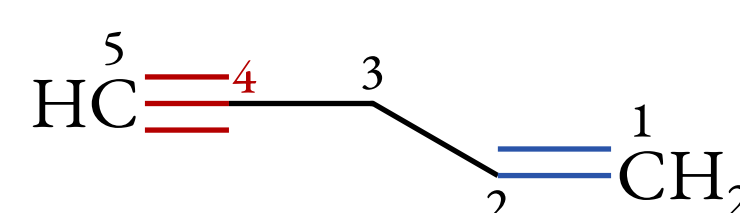
ciclodecano

Alquenos (C=C) y alquinos (C≡C)

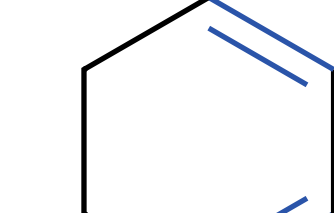
La presencia de **insaturaciones** —**enlaces dobles (C=C)** y **triples (C≡C)**— se indica mediante las **terminaciones –eno** e **–ino**, respectivamente, y **localizadores** definiendo sus posiciones.



buta-1,3-dieno



pent-1-en-4-ino

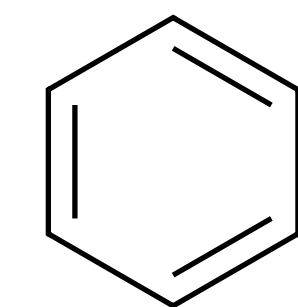


ciclohexa-1,3-dieno

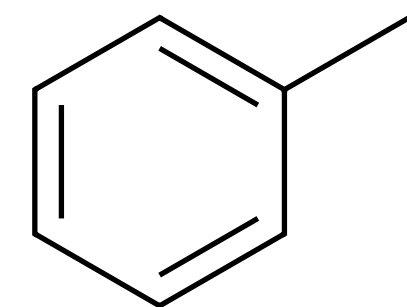
En caso de ser **sustituyentes**, terminan en **–enil(o)** e **–inil(o)**, respectivamente.

Aromáticos (arenos)

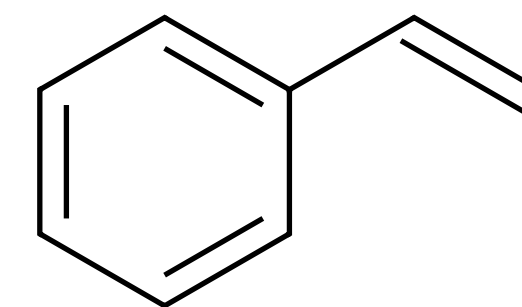
El **benceno**, **C₆H₆**, es el hidrocarburo aromático de **referencia**.



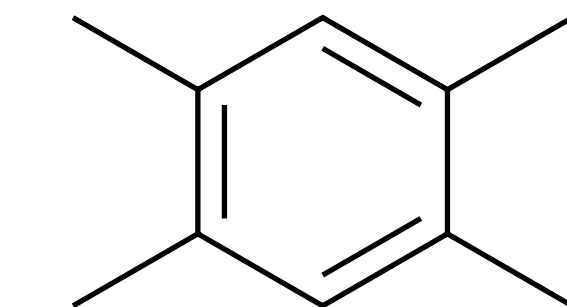
benceno



tolueno (PIN)
(metilbenceno)



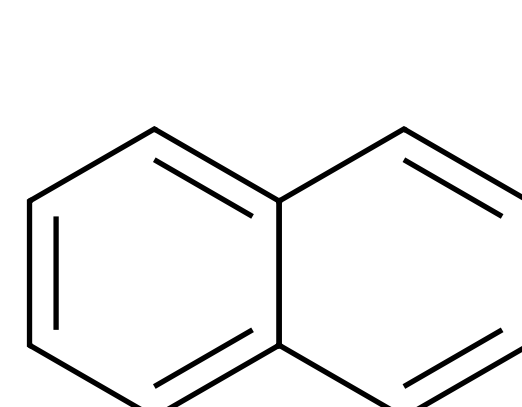
etenilbenceno (PIN)
(estireno)
(vinilbenceno)



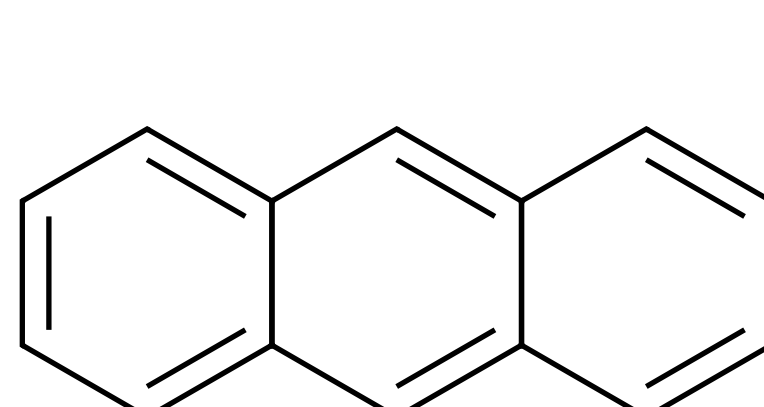
1,2,4,5-tetrametilbenceno (PIN)
(dureno)

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

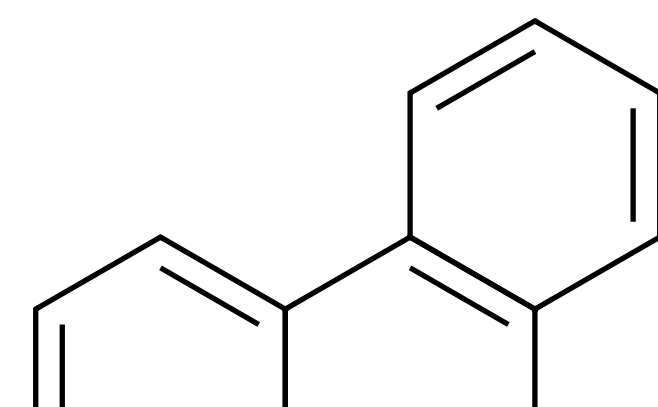
*Arenos policíclicos con importancia en el estudio de **sistemas biológicos***



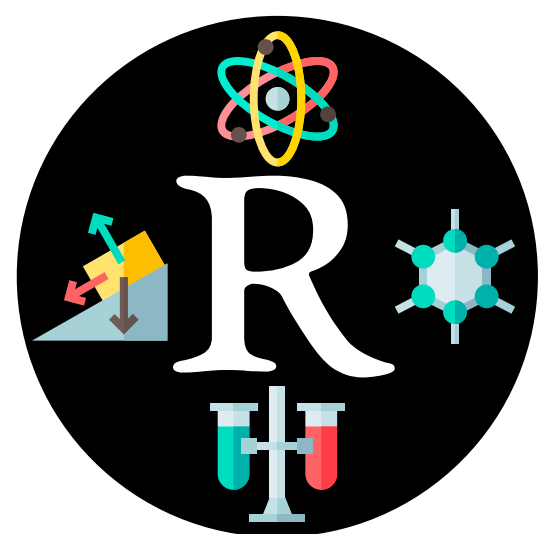
naftaleno



antraceno



fenantreno



FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

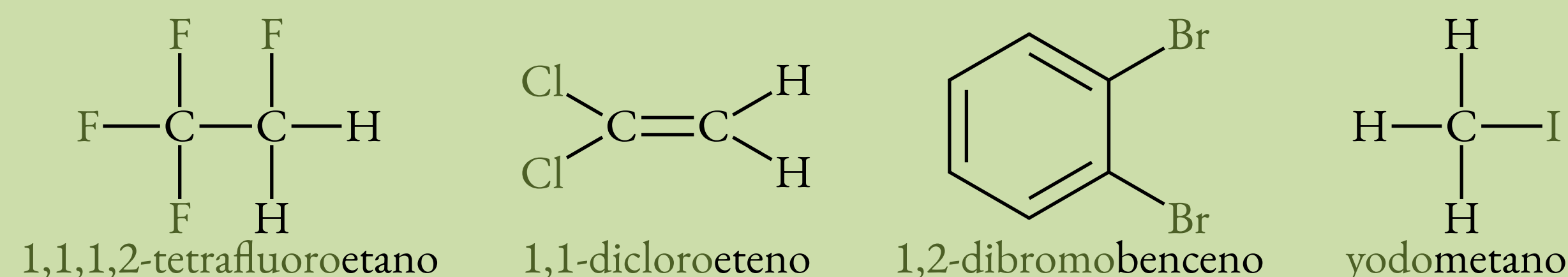
Recomendaciones y nombres preferidos de la IUPAC de 2013

Rodrigo Alcaraz de la Osa



Funciones que contienen halógenos (F, Cl, Br o I)

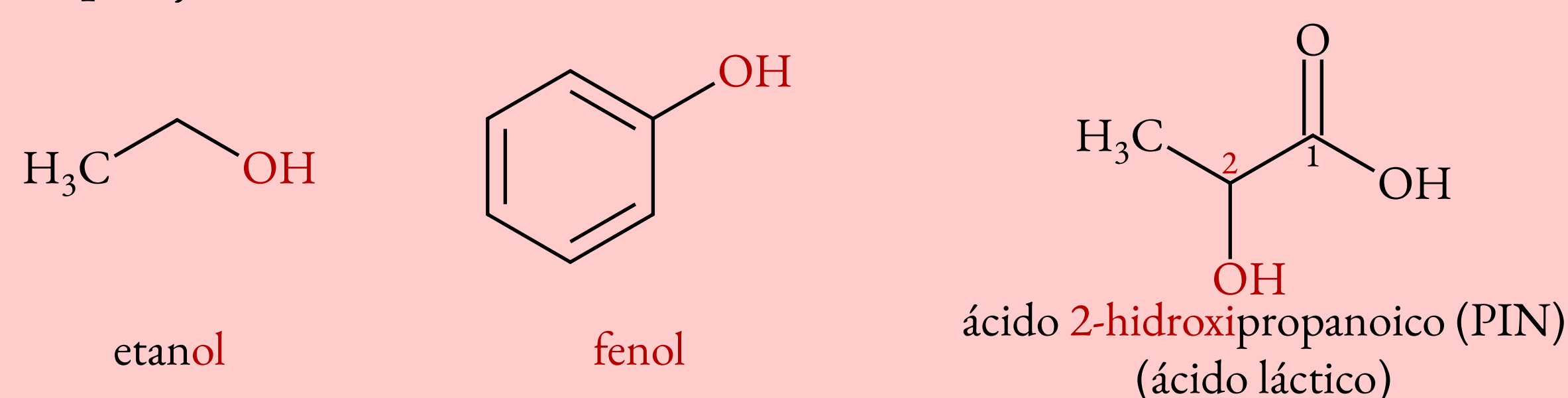
No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo fluoro-**, **cloro-**, **bromo-** o **yodo-**, según corresponda, al nombre del hidrocarburo.



Funciones que contienen oxígeno (O)

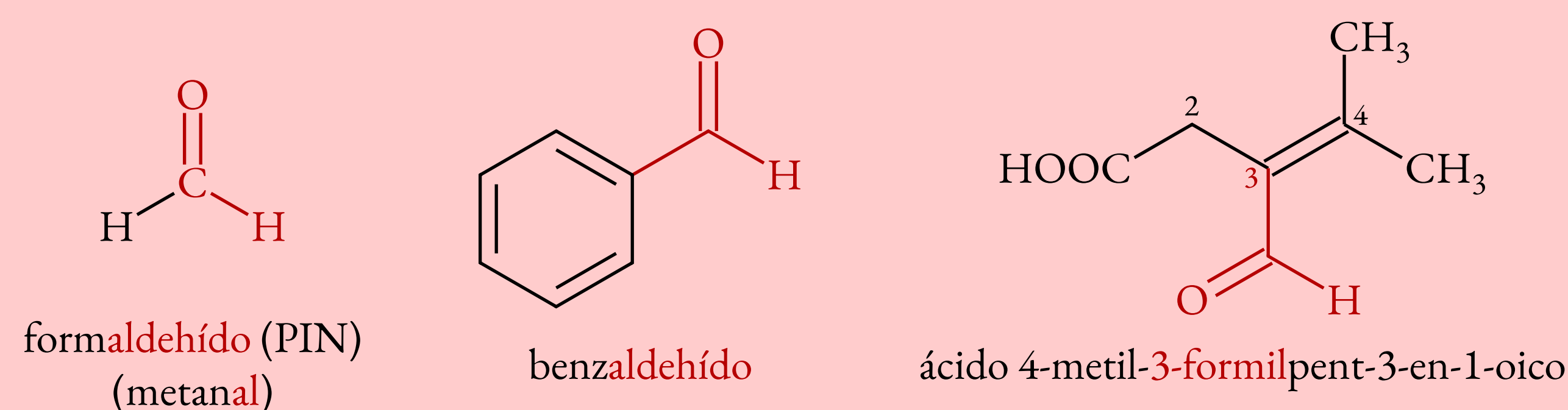
Alcoholes (–OH)

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



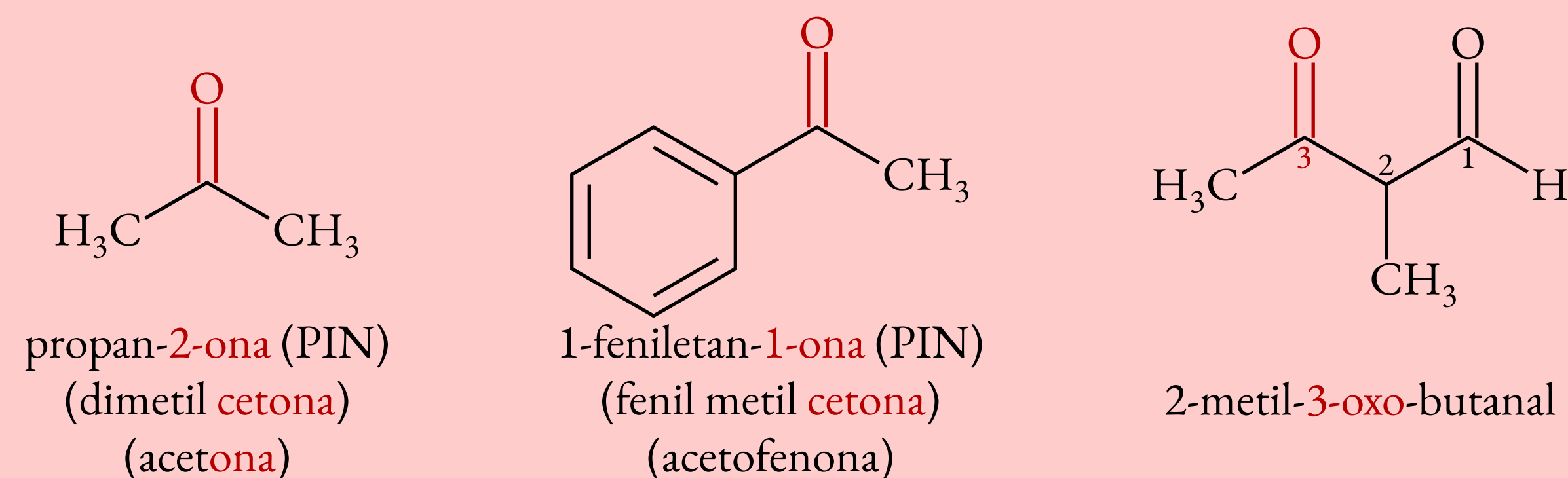
Aldehídos (–CHO)

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



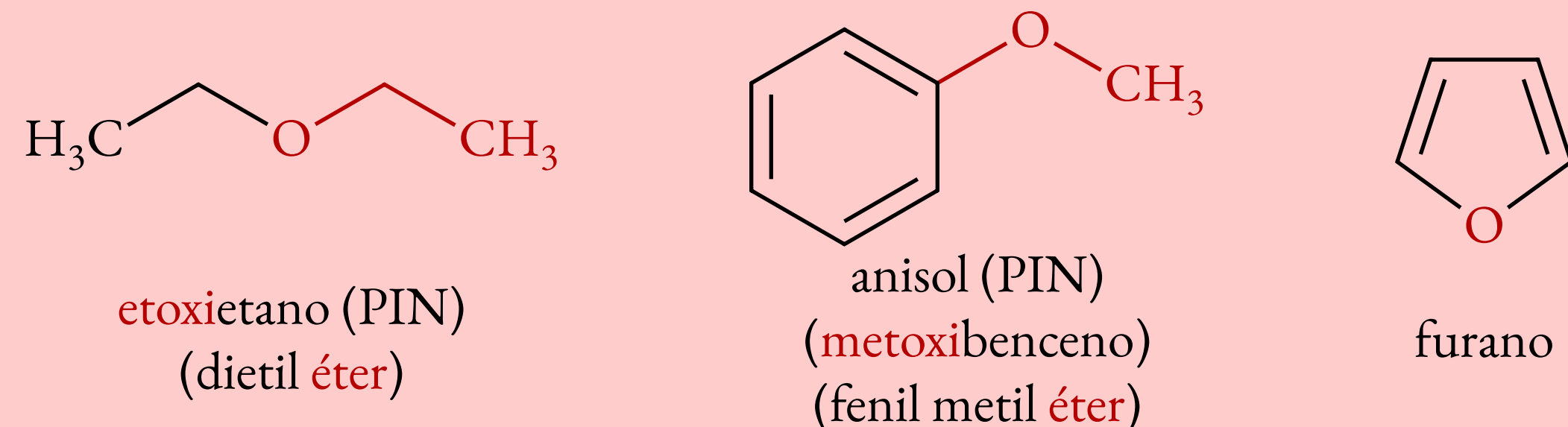
Cetonas (=O)

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



Éteres (–OR)

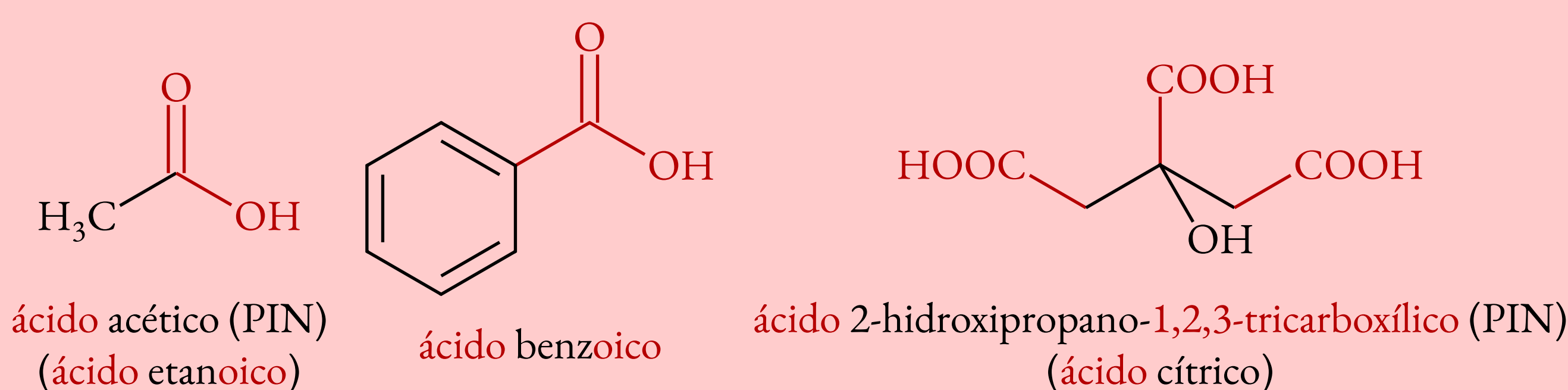
No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo (R)oxi-** al nombre del hidrocarburo.



Funciones que contienen oxígeno (cont.)

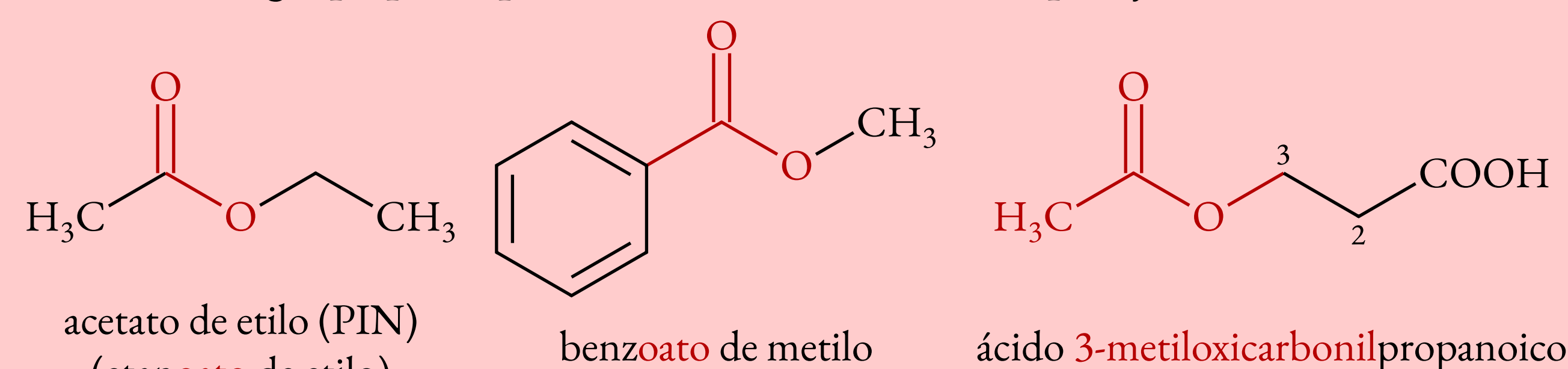
Ácidos carboxílicos (–COOH)

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**.



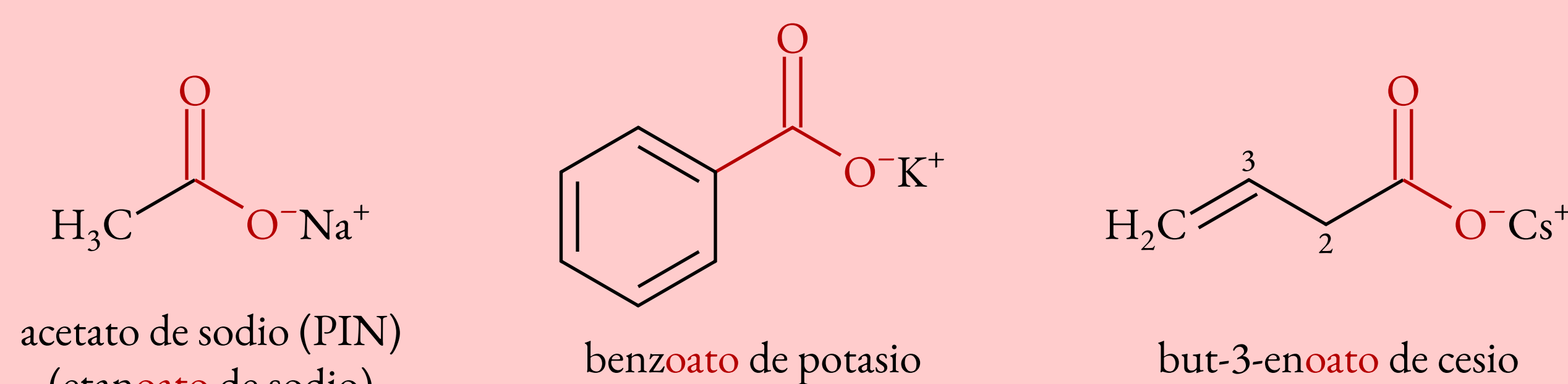
Ésteres (–COOR)

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



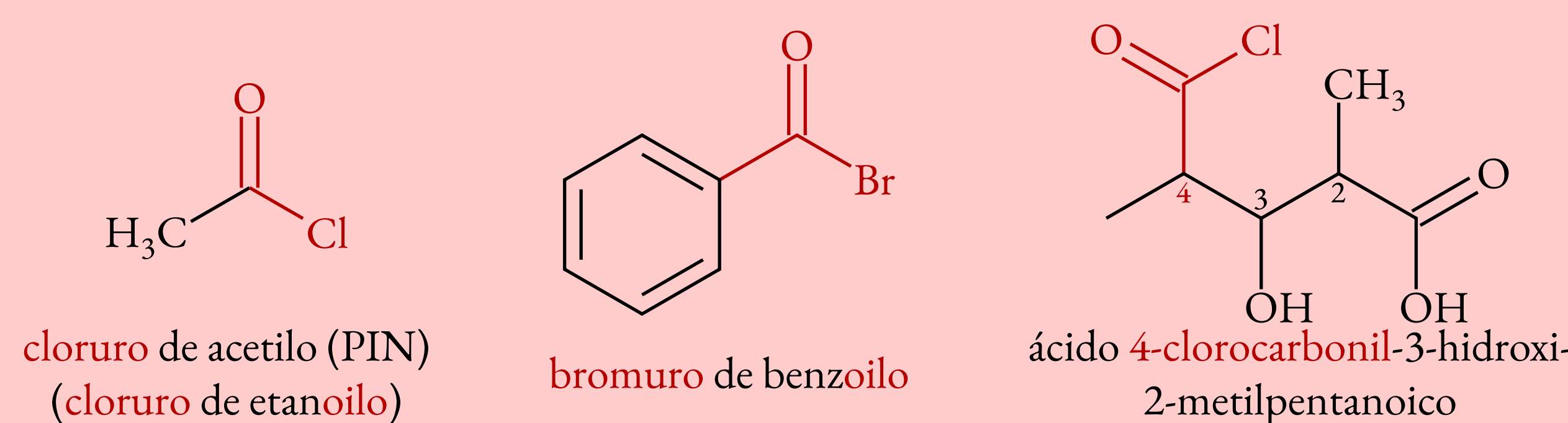
Carboxilatos (–COO[–])

Son la base conjugada de un ácido carboxílico, siendo iones con carga negativa (aniones). Se utiliza la **nomenclatura de clase funcional**, 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 hidroxilo, –OH, por un haluro (F, Cl, Br o I). Se utiliza la **nomenclatura de clase funcional**, 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 halocarbonil-**.



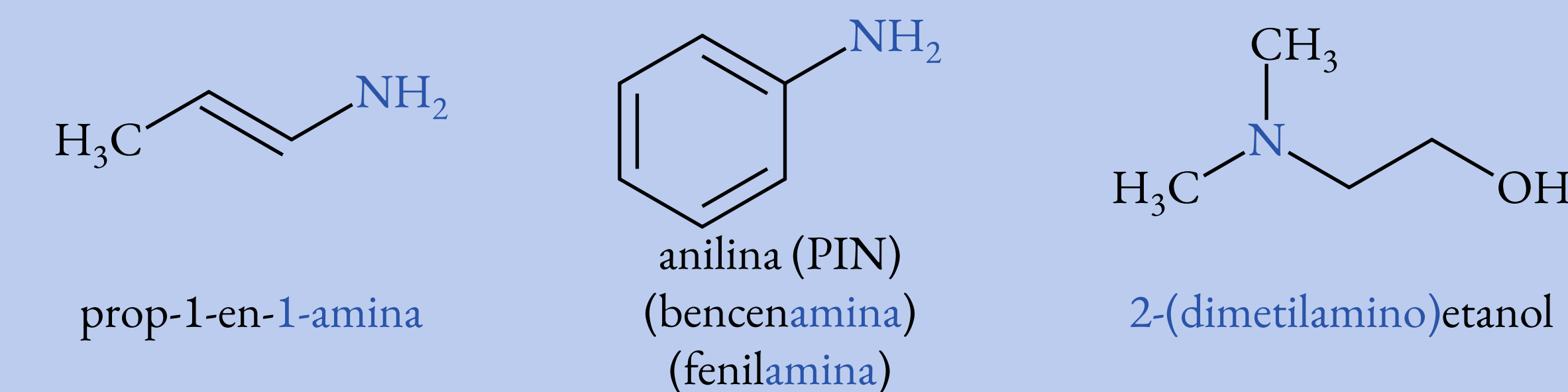
PIN

La nueva edición del Libro Azul incorpora un conjunto jerárquico de criterios para elegir el **nombre único** que se prefiere a efectos de regulación, el **Preferred IUPAC Name**, o **PIN**.

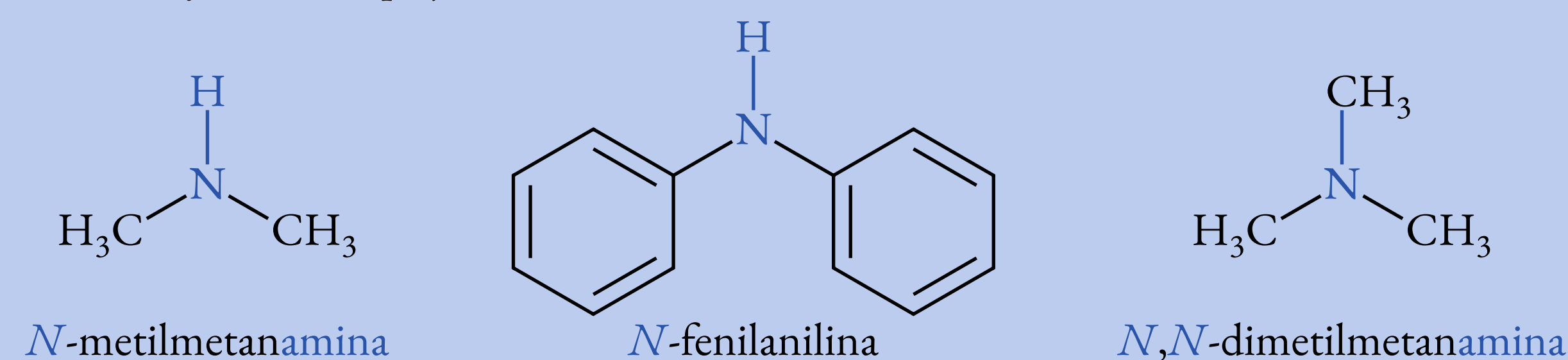
Funciones que contienen nitrógeno (N)

Aminas (–NH₂)

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

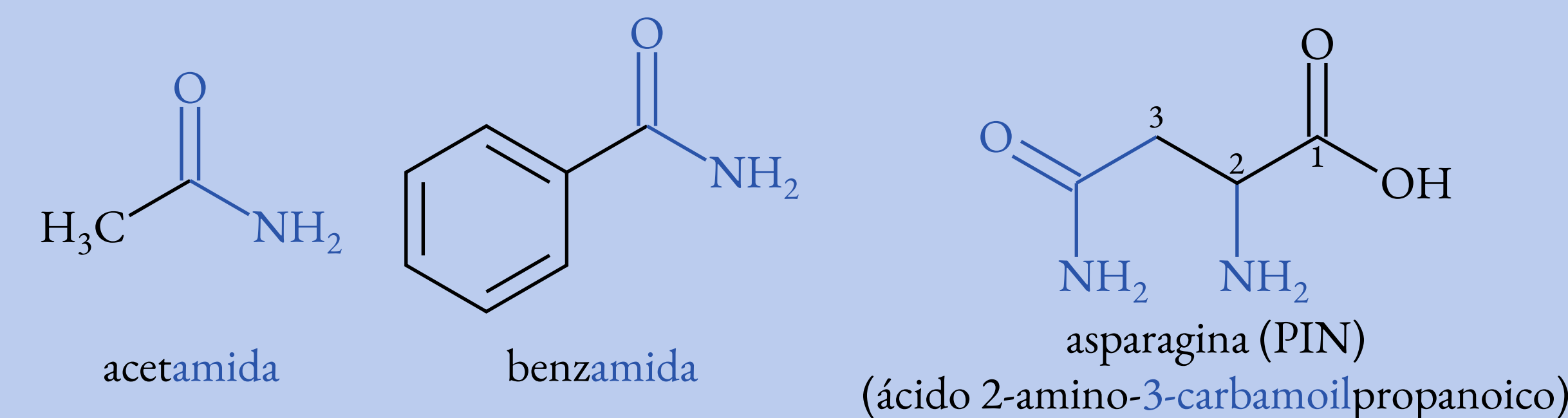


Aminas secundarias y terciarias Cuando se reemplazan hidrógenos del grupo **–NH₂** por sustituyentes complejos se utiliza la letra **N** en vez de números localizadores.



Amidas (–CONH₂)

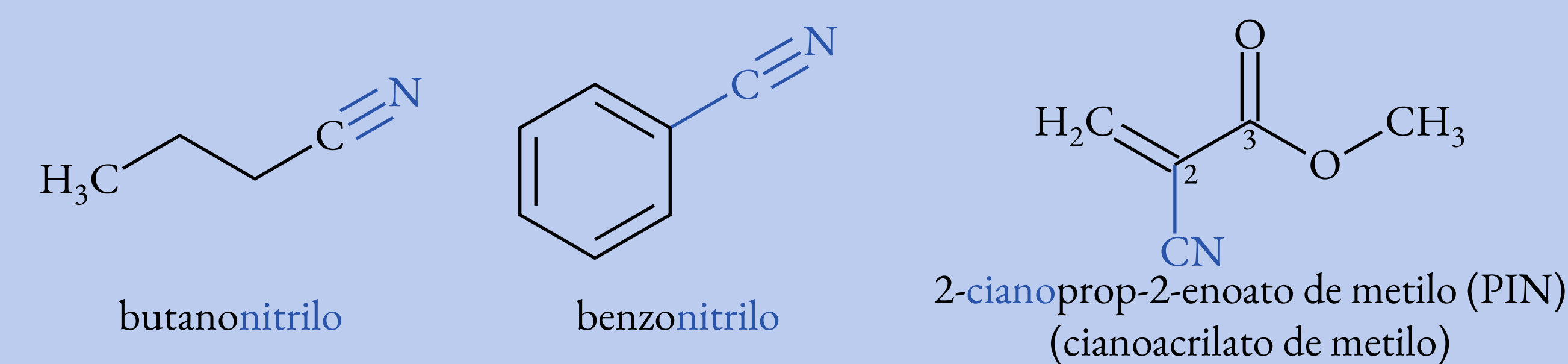
Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo –amida** (o **–carboxamida**) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo carbamoil-**.



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-**.

