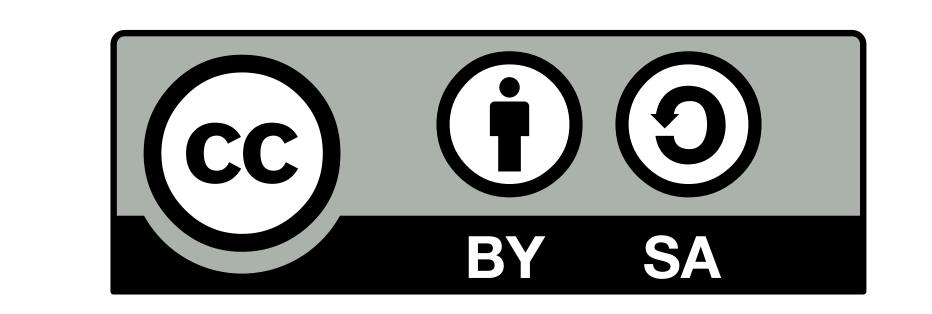


FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

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 (PRINCIPAL) | AL) PREFIJO (SUSTITUYENTE) | | | |
|---------------------|--|-------------------------------------|--|--|--|--|
| Carboxilatos | -COO ⁻ | -carboxilato -oato | carboxilato– | | | |
| Ácidos carboxílicos | -COOН -(C)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 | -CHО -(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.

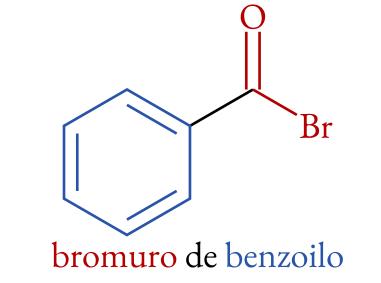
Nomenclatura de clase funcional

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.

$$H_3C$$
 CH_3

propanoato de metilo

H₃C Cl cloruro de acetilo



Representación gráfica (zigzag)

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.

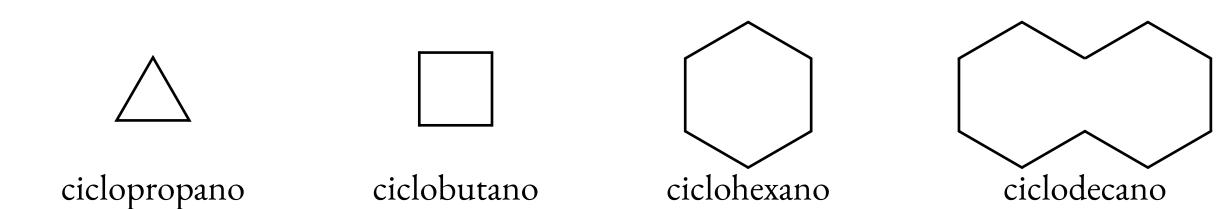
Alcanos (C-C)

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 | E 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—C—C— | -H | I | H_3C | $\sim_{\rm C}$ | H_3 | H_3 | C | | ,CH₃ |
| metano | etano | | | pro | pano | | | but | tano | |

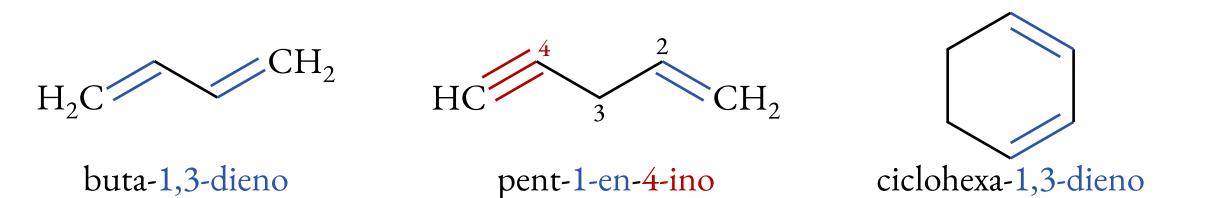
En caso de ser **sustituyentes**, cambian la **terminación** –ano por *–il(o)*.

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



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

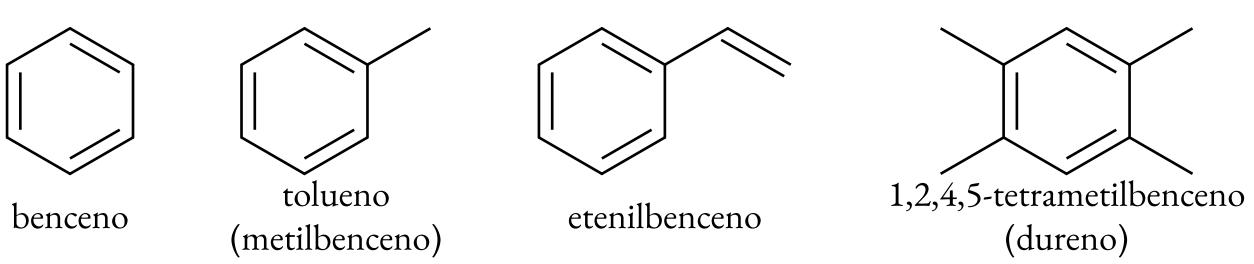
La presencia de **insaturaciones** — enlaces dobles (C=C) y triples (C=C)— se indica mediante las **terminaciones** — eno e — ino, respectivamente, y localizadores definiendo sus posiciones.



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

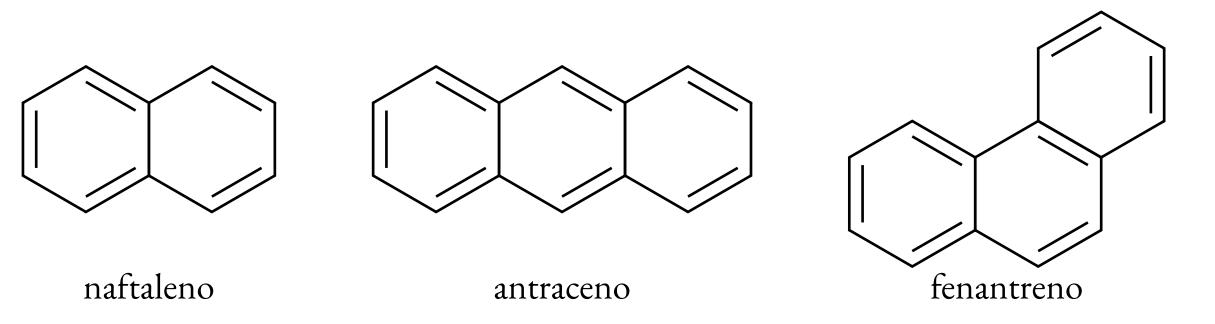
Aromáticos (arenos)

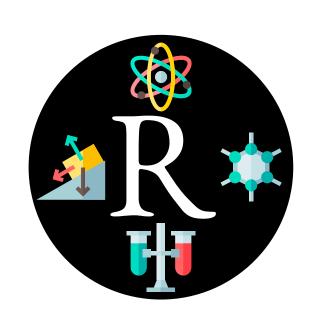
El **benceno**, C_6H_6 , es el hidrocarburo aromático de **referencia**.



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

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

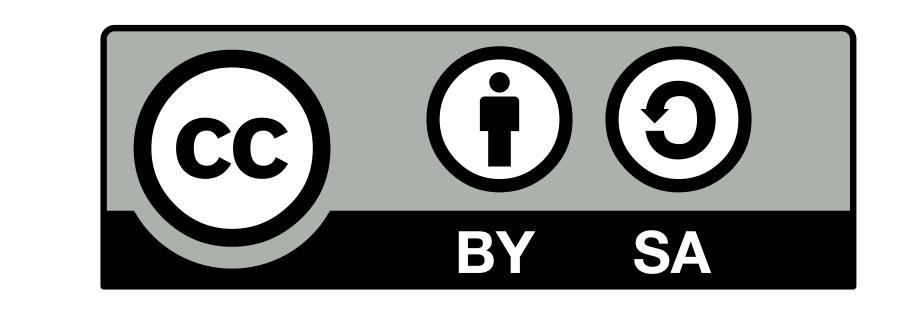




FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

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 [0]

Alcoholes (-OH)

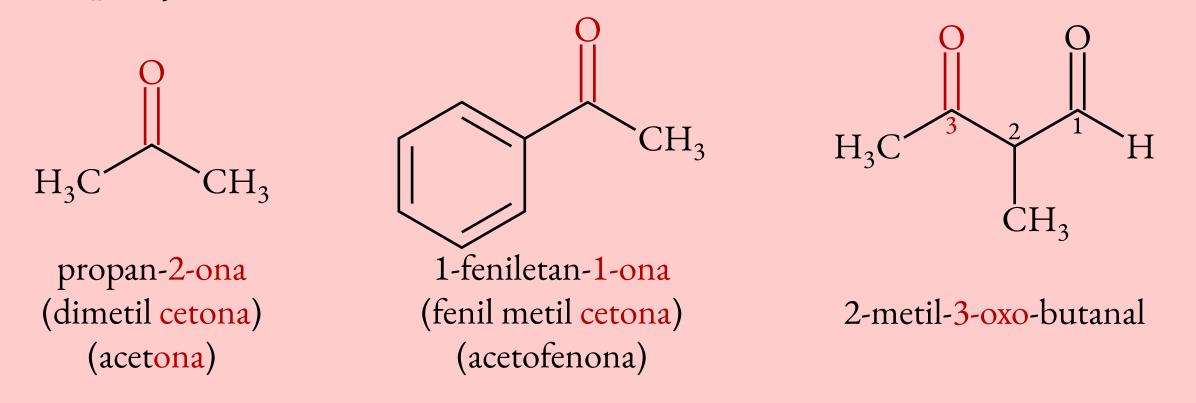
Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** *-ol* al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** *bidroxi*-.

Aldehídos (-CHO)

Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo** — *al* (o — *carbaldehído*) 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)

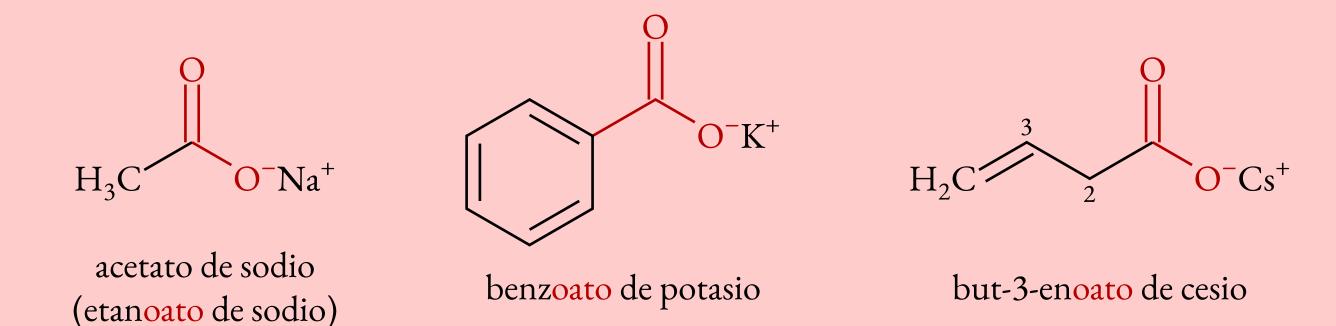
Son compuestos con un **grupo carboxilo**, -C(=O)OH. Si son el **grupo principal** se nombran comenzando por *ácido* y añadiendo el **sufijo** -oico (o -carboxílico) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo** carboxi—. Ej.: **aminoácidos** y **ácidos grasos**.

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 *baluro 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.

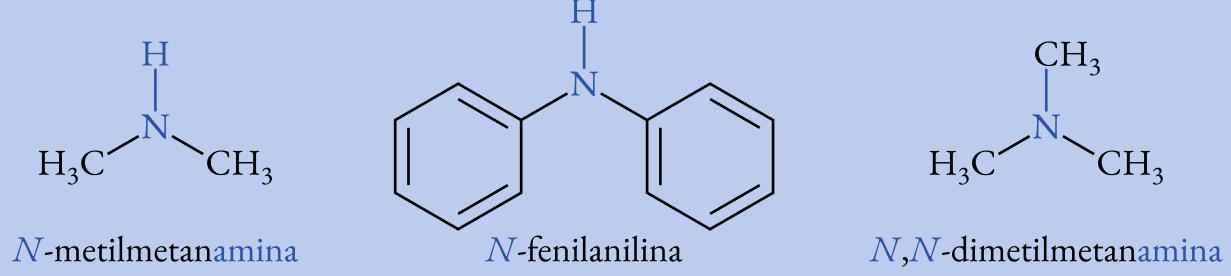
funciones que contienen nitrógeno [N]

Aminas (-NH₂)

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

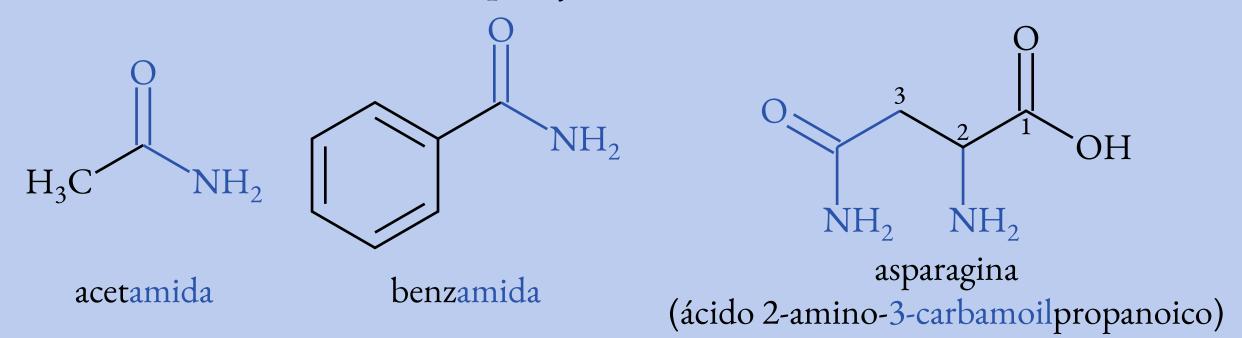


sustituyentes complejos se utiliza la letra N en vez de números localizadores.



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 $(-C \equiv N)$

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*—.

$$O_2N$$
 O_2N
 O_2N