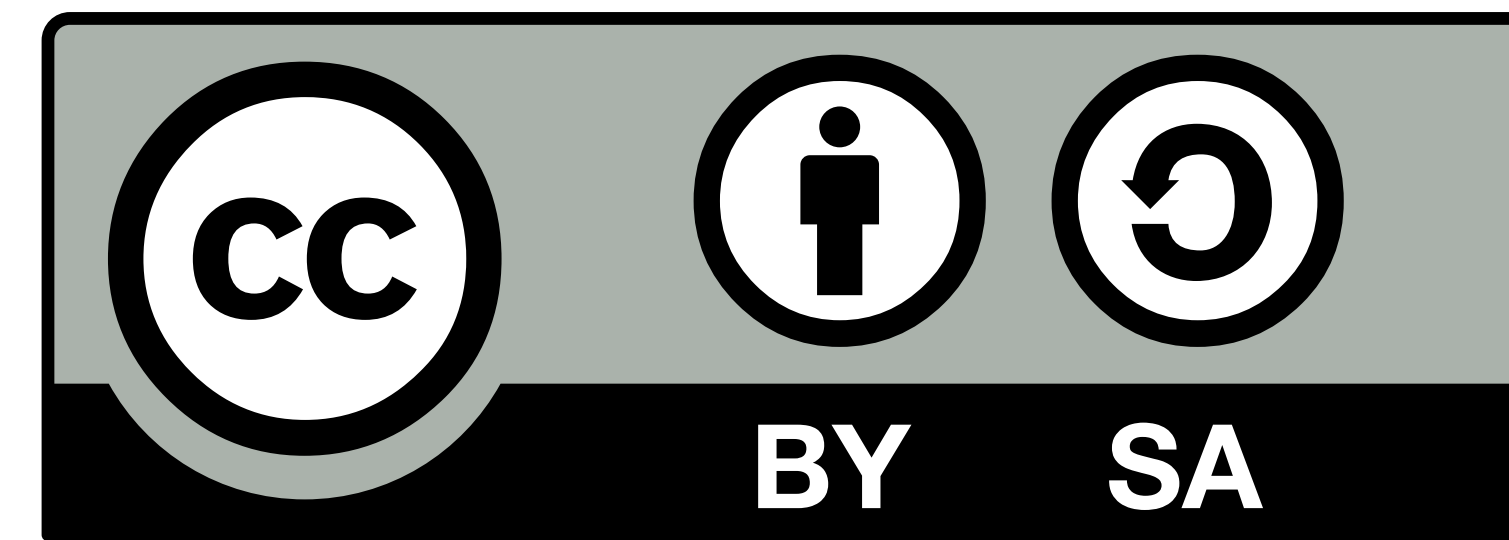


FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

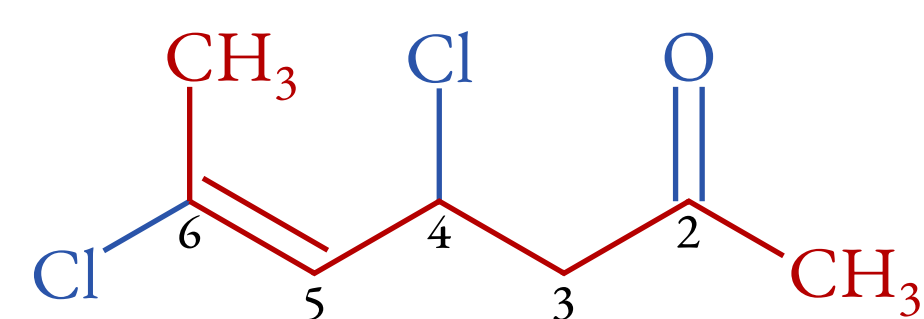
Conceptos previos

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**:

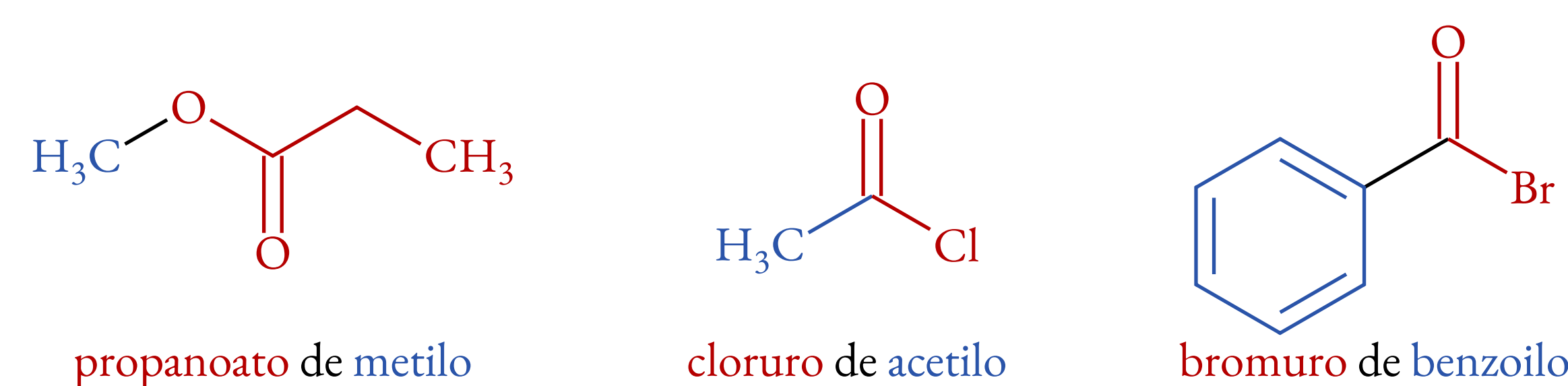
GRUPO FUNCIONAL	FÓRMULA*	SUFIJO (PRINCIPAL)	PREFIJO (SUSTITUYENTE)
Carboxilatos	-COO ⁻ -(C)OO ⁻	-carboxilato -oato	carboxilato-
Ácidos carboxílicos	-COOH -(C)OOH	ácido ...carboxílico ácido ...oico	carboxi-
Ésteres	-COOR -(C)OOR	...carboxilato (de R) ...oato (de R)	(R)oxicarbonil-
Haluros de ácido	-COX -(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.

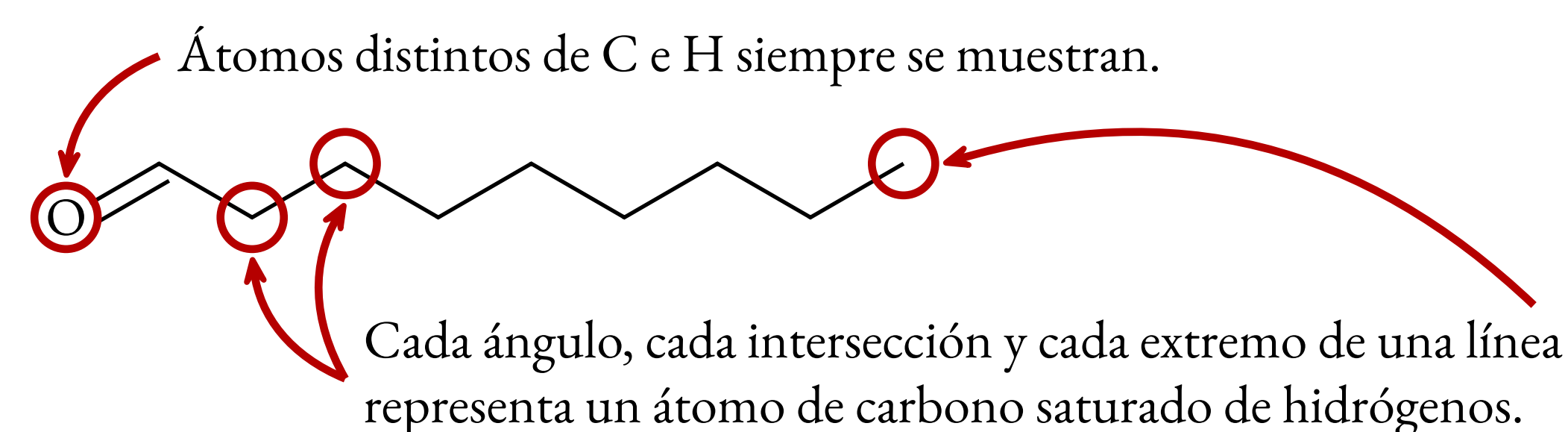
** Los éteres, haloalcanos y nitrocompuestos se representan por prefijos en orden alfabético.

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.



Representación gráfica (zigzag)



Compuestos padre (hidrocarburos)

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

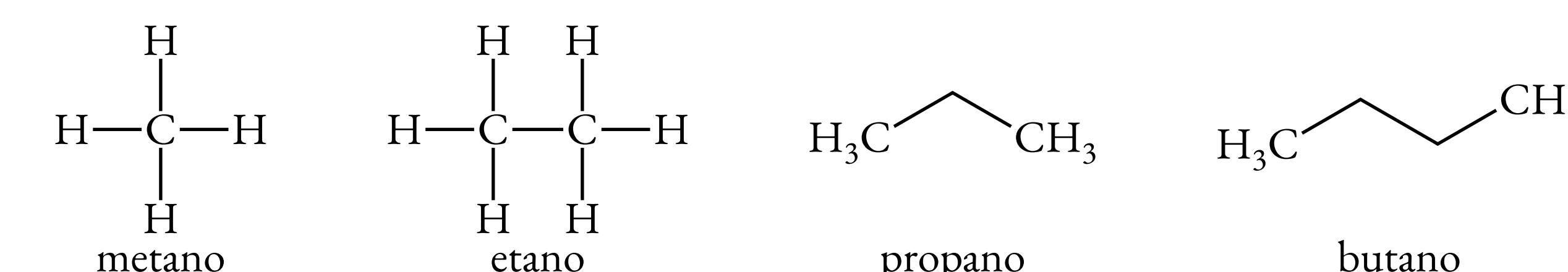
Alifáticos Pueden ser de **cadena abierta** (acíclicos) o **cerrada** (cíclicos).

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

Alcanos (C-C)

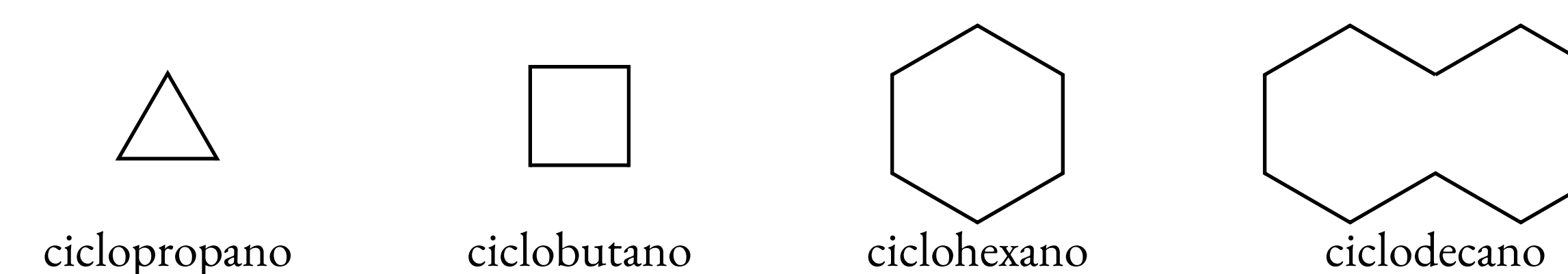
Hidrocarburos en los que los **enlaces C-C** son todos **simples**. Se nombran con un **prefijo** que indica el número de átomos de C y la **terminación -ano**.

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)-	...



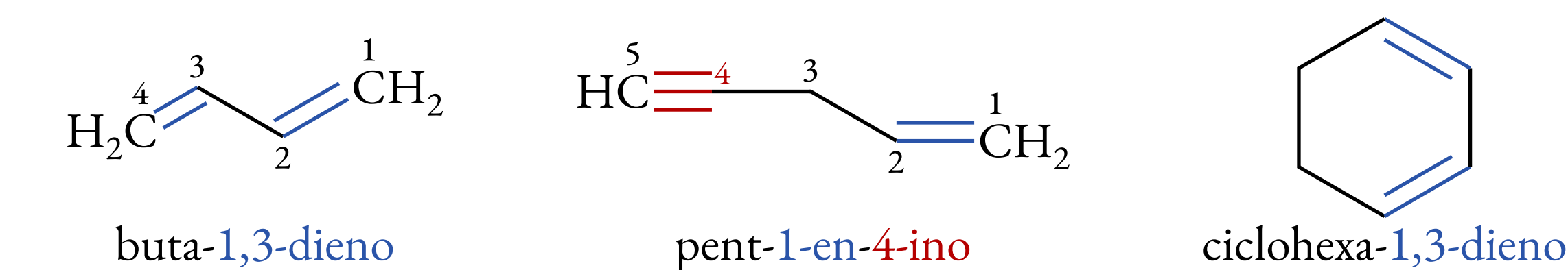
En caso de ser **sustituyentes**, cambian la **terminación -ano** por **-il(o)**.

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



Alquenos (C=C) y alquinos (C≡C)

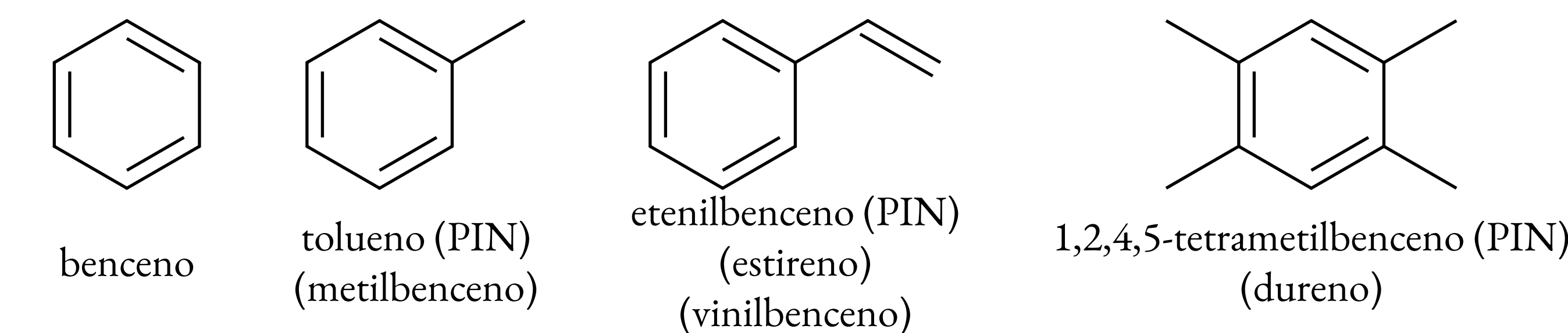
La presencia de **insaturaciones —enlaces dobles (C=C) y triples (C≡C)—** se indica mediante las **terminaciones -eno** e **-ino**, respectivamente, y **localizadores** definiendo sus posiciones.



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

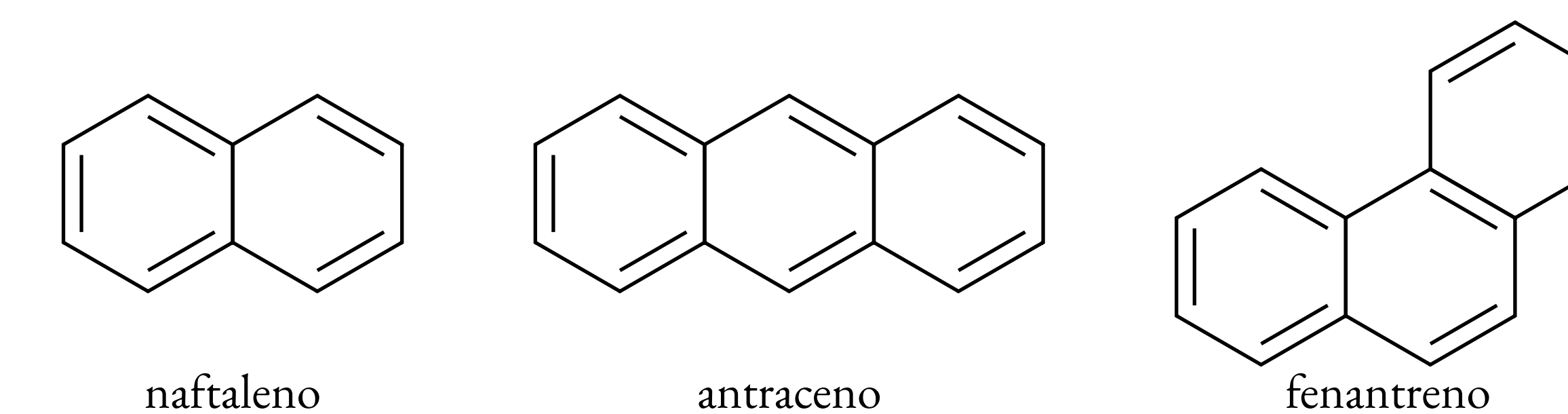
Aromáticos (arenos)

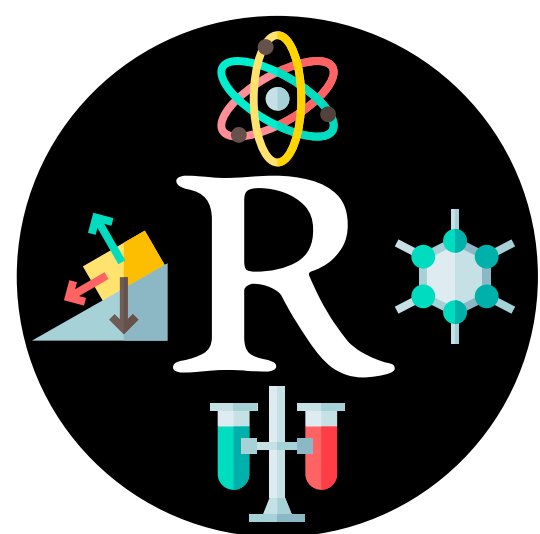
El **benceno**, **C₆H₆**, es el hidrocarburo aromático de **referencia**.



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

Arenos policíclicos con importancia en el estudio de sistemas biológicos

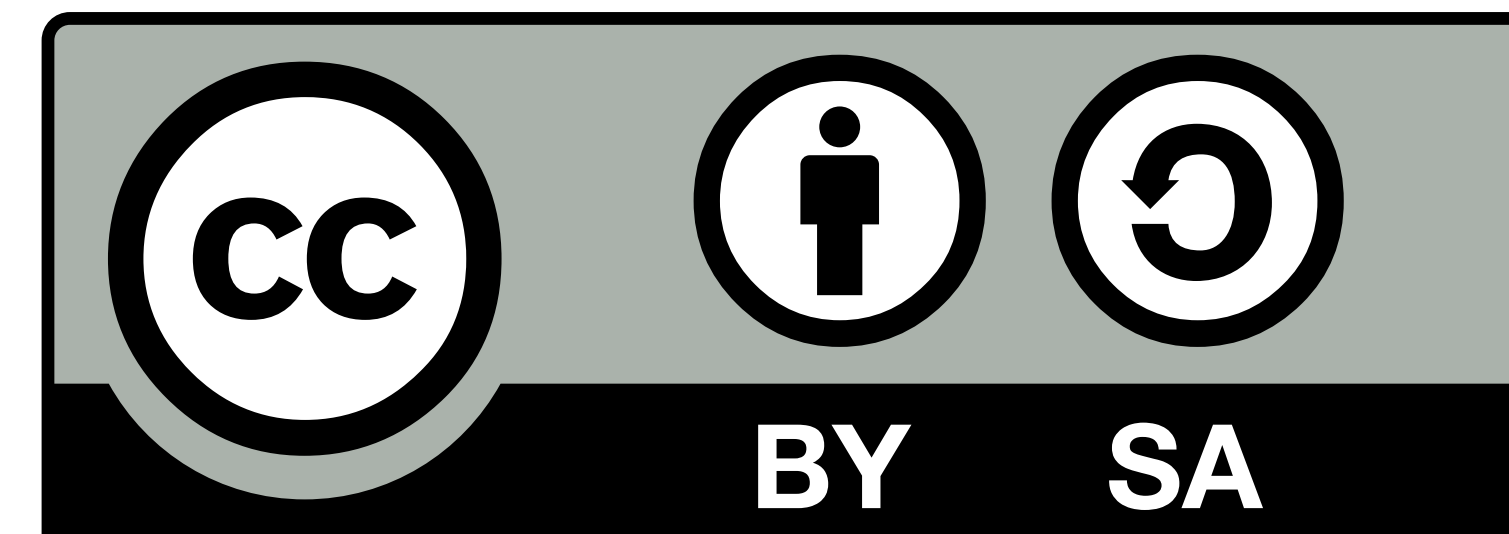




FORMULACIÓN Y NOMENCLATURA ORGÁNICA

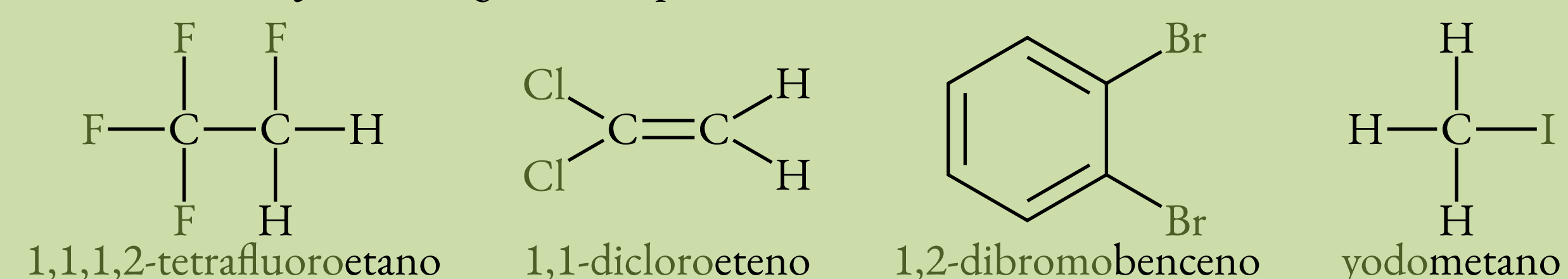
Recomendaciones y nombres preferidos de la IUPAC de 2013

Rodrigo Alcaraz de la Osa



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

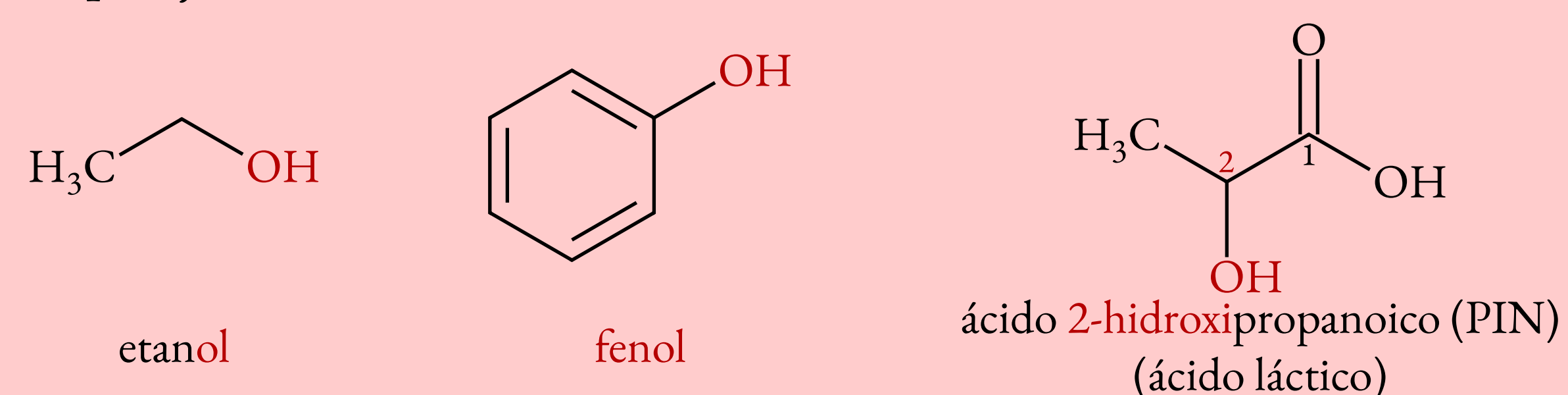
No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo fluoro-**, **cloro-**, **bromo-** o **yodo-**, según corresponda, al nombre del hidrocarburo.



Funciones que contienen oxígeno (O)

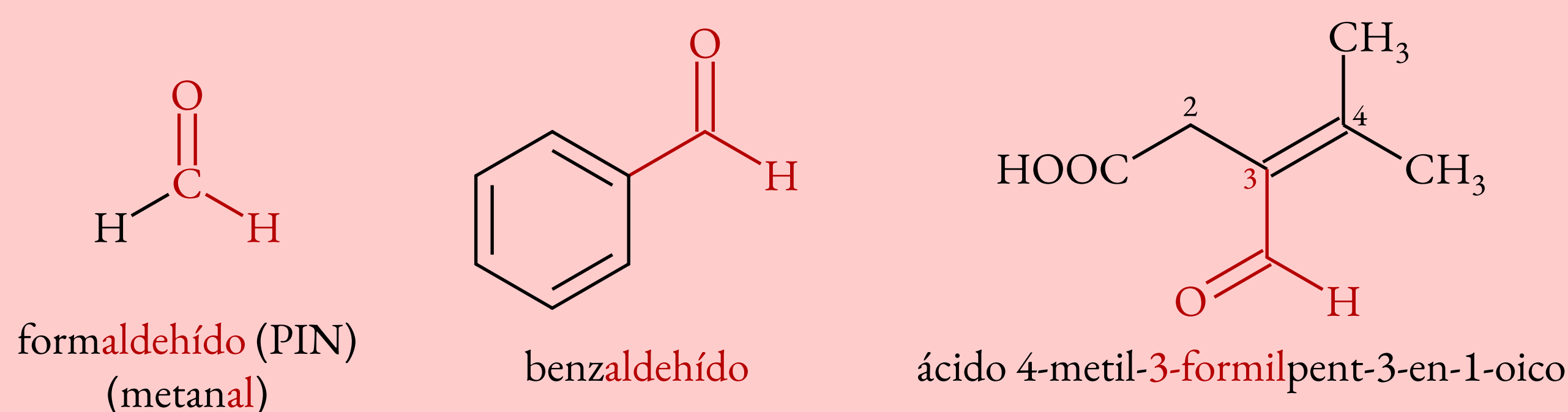
Alcoholes (-OH)

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



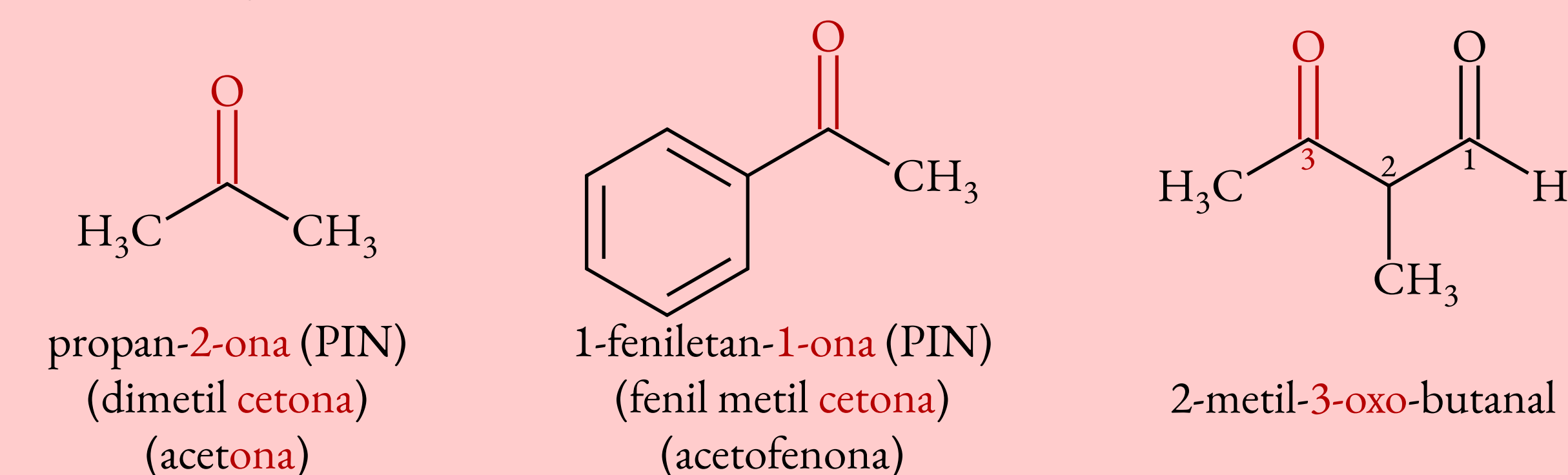
Aldehídos (-CHO)

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-**).



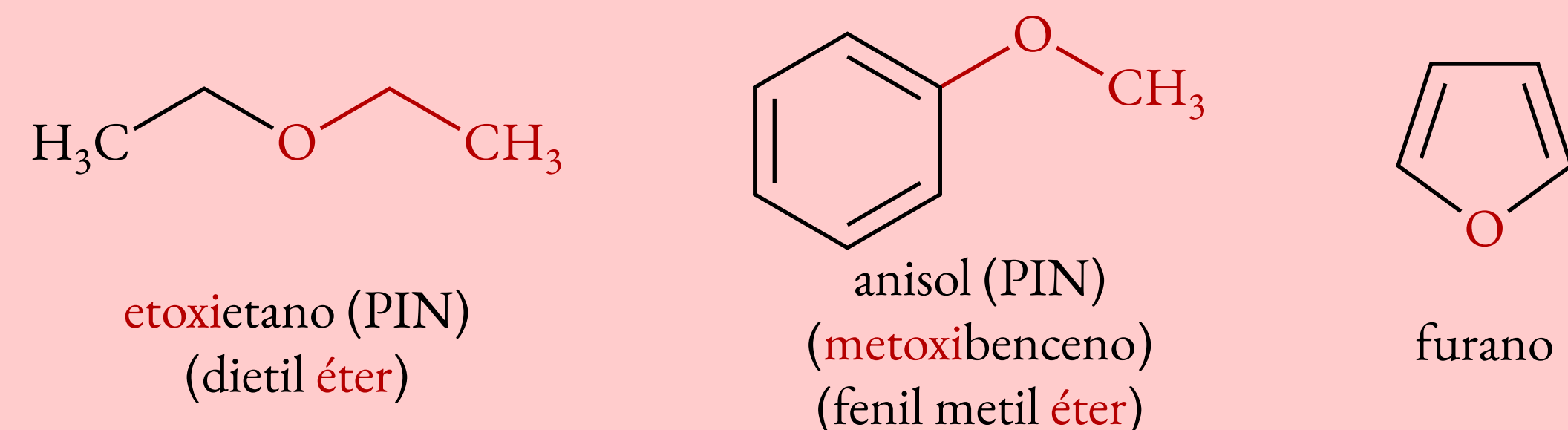
Cetonas (=O)

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



Éteres (-OR)

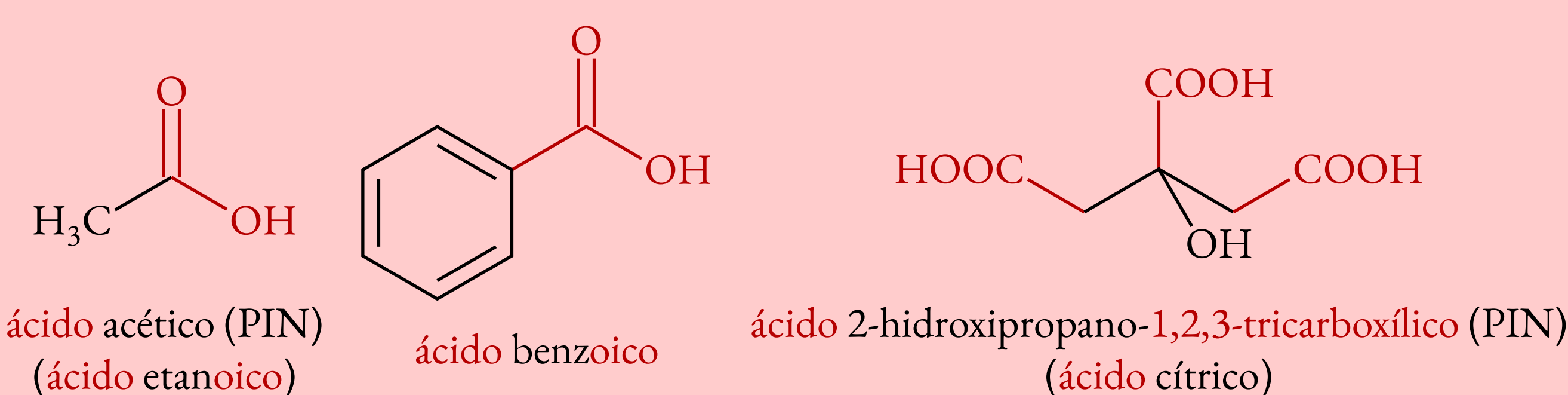
No pueden ser nunca el grupo principal, por lo que se nombran añadiendo el **prefijo (R)oxi-** al nombre del hidrocarburo.



Funciones que contienen oxígeno (cont.)

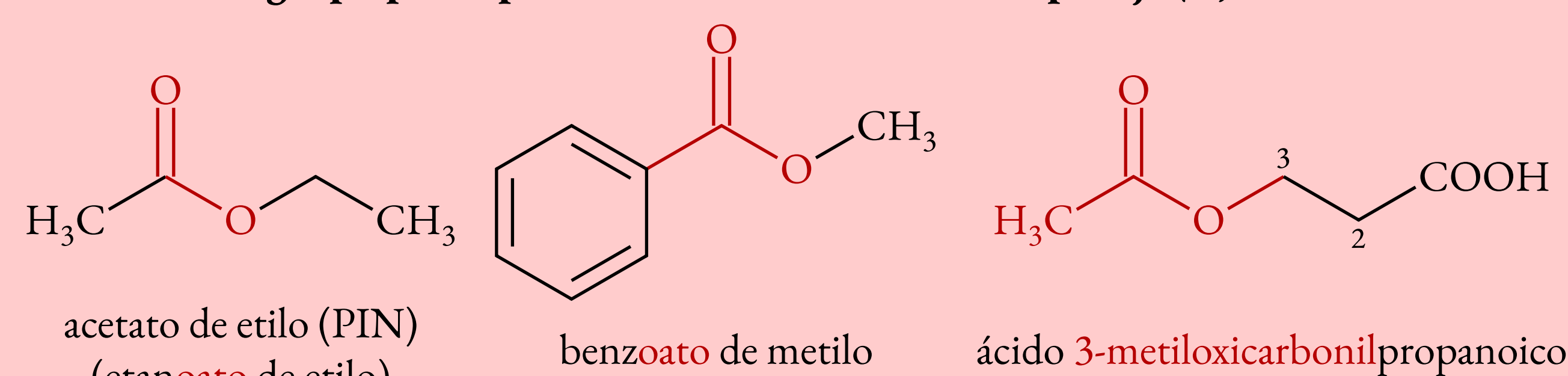
Ácidos carboxílicos (-COOH)

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**.



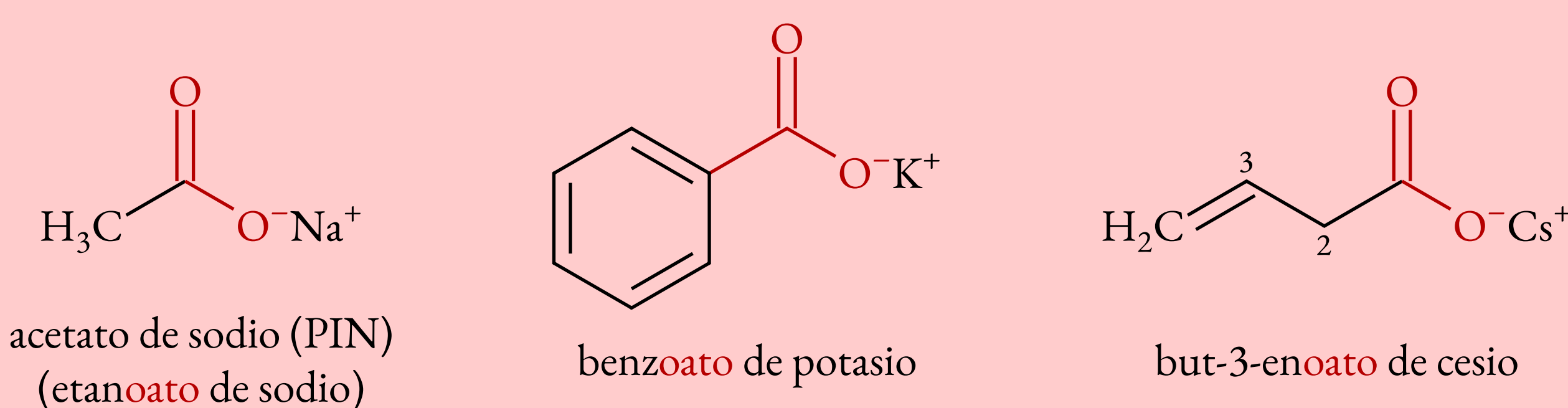
Ésteres (-COOR)

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-**.



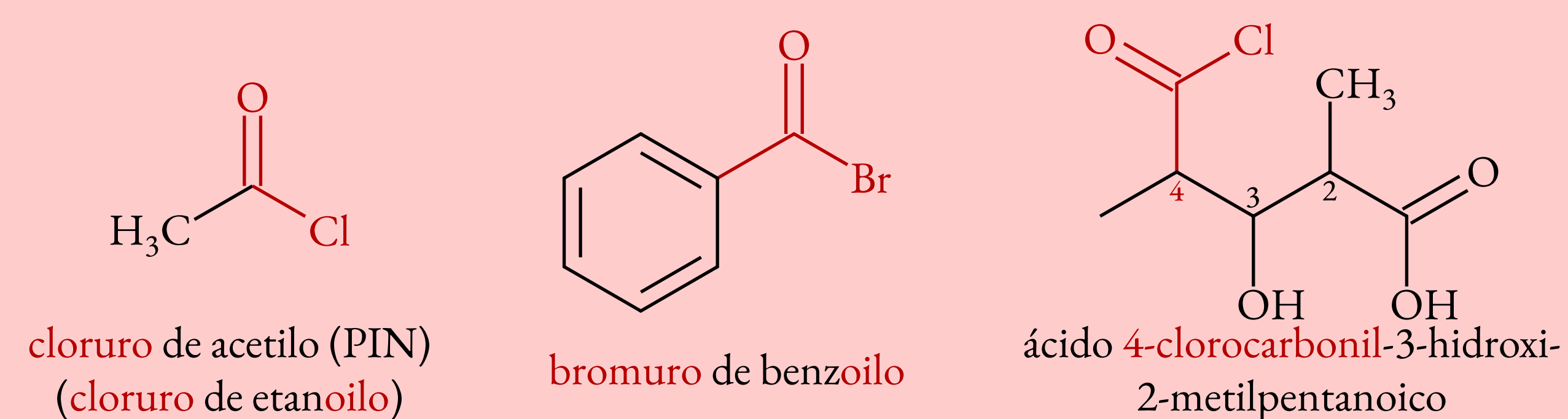
Carboxilatos (-COO⁻)

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-**.



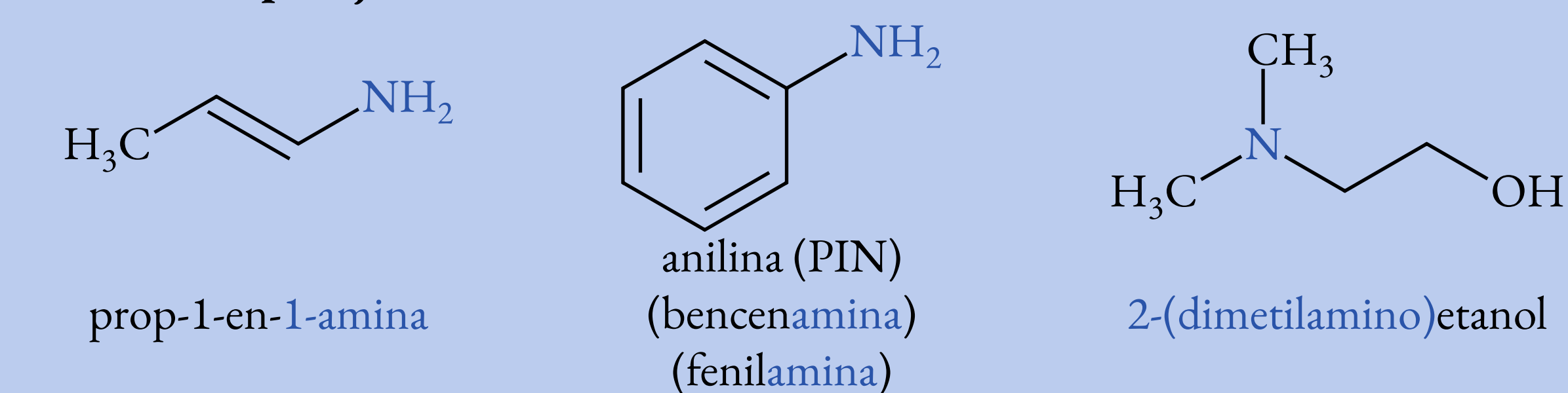
PIN

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**.

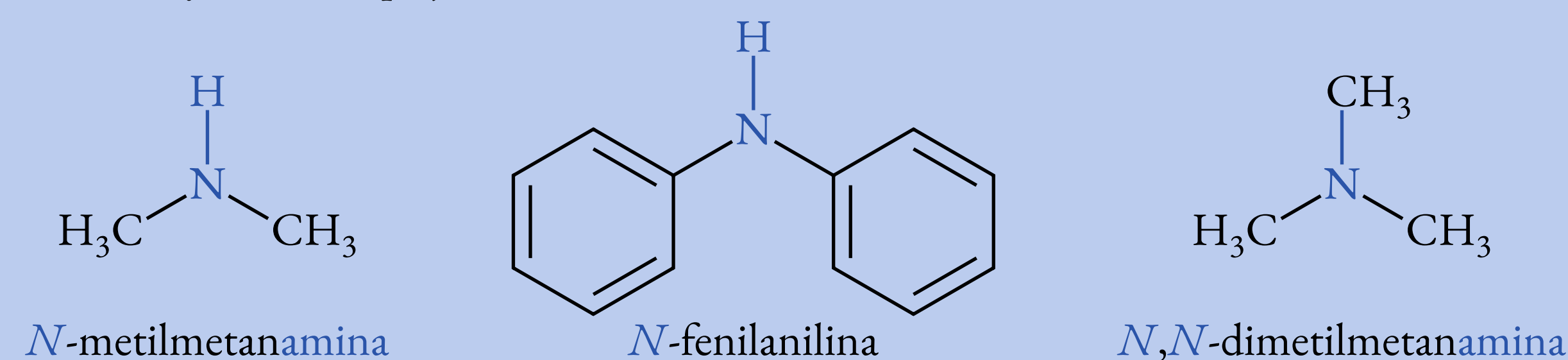
Funciones que contienen nitrógeno (N)

Aminas (-NH₂)

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

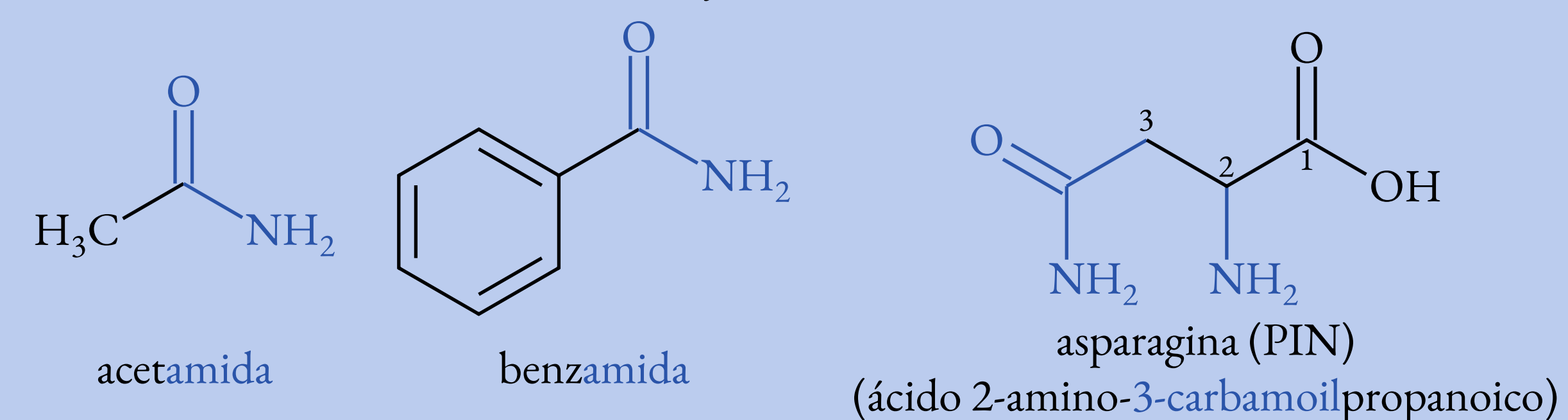


Aminas secundarias y terciarias Cuando se reemplazan hidrógenos del grupo -NH₂ por sustituyentes complejos se utiliza la letra **N** en vez de números localizadores.



Amidas (-CONH₂)

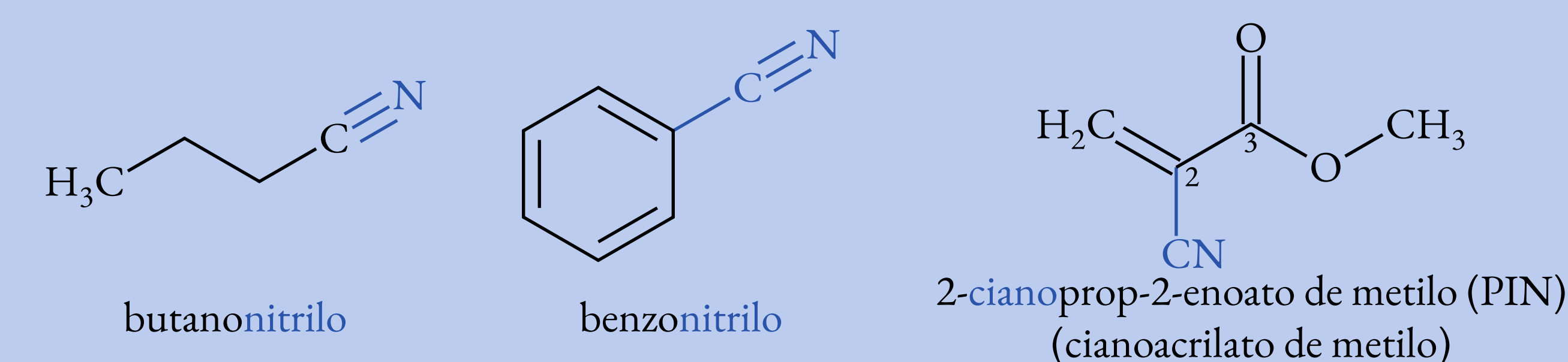
Si son el **grupo principal** se añade el **sufijo -amida** (o **-carboxamida**) al nombre del hidrocarburo, en caso contrario se utiliza el **prefijo carbamoil-**.



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-**.

