

NOMENCLATURA Y FORMULACION

RESUMEN NORMAS IUPAC

La nomenclatura de compuestos orgánicos puede llegar a ser extraordinariamente compleja. En este seminario sólo se pretende dar unas nociones muy elementales de la misma. La **IUPAC** (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) dicta las normas que se encuentran recogidas en libros especializados.

Esquema

DETECCIÓN DE LA CADENA PRINCIPAL Y ASIGNACIÓN DE LOCALIZADORES a los grupos funcionales y cadenas laterales

1. Identificar la existencia de un grupo funcional

1.1 Si NO existe grupo funcional:

La cadena Principal será aquella que contenga el mayor nº de átomos de Carbono, es decir, la más larga y continua, y todo lo que cuelgue de ella serán cadenas laterales. A continuación se numeran los átomos de carbono de la cadena principal de un extremo a otro, de tal forma que se asignen los números más bajos a los carbonos que poseen cadenas laterales.

Si tenemos dos sustituyentes a igual distancia de los extremos se utiliza el orden alfabético, sin tener en cuenta las partículas multiplicativas como di, tri, tetra,.... (“etil”, predomina sobre “dimetil”, ya que “di” no lo consideramos) para determinar el ordenamiento.

Los sustituyentes se nombran por orden alfabético. Los prefijos di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, sec-, tert-, no se cuentan a la hora de establecer el orden alfabético. Los iso-, neo-, ciclo- en cambio sí.

Si hay varios sustituyentes complejos unidos a la cadena principal se nombran poniendo entre los números localizadores y el paréntesis los prefijos bis, tris, tetraquis, etc.

!!!! ATENCIÓN!!!!

“Observar bien, y asegurarse de que no existe ninguna cadena mayor o varias iguales, para ello se recorrerán todos los posibles caminos contando el nº de carbonos que puedo seguir sin levantar el lápiz, la percepción visual puede jugar malas pasadas”

“al numerar debemos tener en cuenta que siempre tendremos dos posibilidades según por el extremo de la cadena que comencemos, la numeración correcta será aquella que asigne los números más bajos a las posiciones de las cadenas laterales.”

1.1.1 en el caso de **tener varias cadenas de igual longitud máxima**, se elegirá la cadena principal de acuerdo con los siguientes criterios:

- a. La cadena principal será aquella que tenga el **mayor nº de cadenas laterales** ó ramificaciones, si tienen las mismas pasamos al criterio b)
- b. La que tenga los **localizadores más bajos para las cadenas laterales**. Si los localizadores son iguales entonces pasaremos al criterio c).
- c. La cadena principal será aquella que tenga el **máximo** (el mayor) **número de átomos de carbono en las cadenas laterales más pequeñas**.

Para esto detectamos la cadena lateral mayor que posea, y no la tenemos en cuenta, luego sumamos los átomos de carbono de las cadenas laterales que queden, y los comparamos la cadena que tenga una suma mayor será la principal. Si este criterio no nos sirve, pasaremos al d)

- d. La cadena que tenga las cadenas laterales lo menos ramificadas posibles, es decir más sencillas.

En el caso de cicloalcanos se antepone el prefijo ciclo- al nombre del alcano de igual número de átomos de C.

- En caso de **cicloalcanos con una sola ramificación** si el sustituyente tiene más átomos de Carbono, entonces ese sustituyente es la cadena principal. Si el sustituyente tiene igual o menor número de átomos de Carbono entonces la cadena principal es el cicloalcano y no es necesario numerar la posición del sustituyente porque se le supone la posición 1..
- En caso de **cicloalcanos con múltiples ramificaciones** se ordenan alfabéticamente los sustituyentes (sin tener en cuenta las partículas multiplicativas, que indican el nº de sustituyentes de la misma naturaleza) y se indica su posición relativa con un número asignándoles los localizadores más bajos posibles.

1.2 Si EXISTE grupo Funcional

La función principal determina

- El nombre del compuesto
- La cadena carbonada principal, que debe ser la más larga posible **que contenga la función principal**.
- Los números localizadores de los sustituyentes y funciones secundarias

1.2.1 Si existe UN UNICO grupo funcional

La cadena Principal será aquella que contenga el mayor nº de átomos de Carbono (la mas larga) Y QUE CONTENGA al grupo funcional . A continuación se numeran los átomos de carbono de la cadena principal COMENZANDO POR EL CARBONO DEL GRUPO FUNCIONAL .

Si existen varias posibilidades se seguirán los criterios del punto 1.1.1

¡¡¡¡ATENCIÓN!!!!

“Nos situaremos en el grupo funcional y buscaremos la cadena mas larga que lo contiene”

“Cuando un grupo funcional solo puede ir en los extremos de la cadena , se omite el localizador a la hora de nombrarlo, porque debemos dar por supuesto que el localizador debe ser uno”

1.2.2 Si existen VARIOS grupos funcionales IGUALES ó DISTINTOS :

PRIMERO : Si son distintos debemos priorizarlos , de manera que uno de ellos será grupo principal, y el otro será grupo secundario.

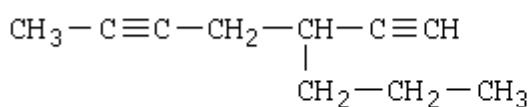
Debemos hacer una mención especial al caso de dobles y triples enlaces en el mismo compuesto:

Se elige como cadena principal la que contenga el mayor nº de insaturaciones (dobles y triples), si existen varias posibilidades la cadena más larga.

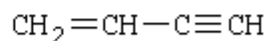
Si en una molécula existen **dobles y triples enlaces** se les asigna los **localizadores más bajos posibles sin realizar distinciones entre dobles y triples**. Al nombrarlos se indican **primero los dobles enlaces** y después los triples, es decir son **ENINOS**. ¡¡¡¡SIEMPRE!!!!

La posición del doble o triple enlace se indica mediante el **localizador del primero de los átomos** que intervienen en el doble o triple enlace

Solamente si un **doble y triple enlace están en posiciones equivalentes** se empieza a numerar por el extremo que da **el localizador más bajo al doble enlace**.



3-propil-1,5-heptadiino



1-buten-3-ino

¡¡¡¡ATENCIÓN!!!!

“Los grupos funcionales tienen distintos nombres según vayan como grupos principales o como secundarios (excepto el doble y el triple enlace que se nombran igual si van solos o como secundarios), es imprescindible conocer dichos nombres para identificarlos”

SEGUNDO: *Escogeremos la cadena Principal mas larga QUE CONTENGA el mayor nº de grupos funcionales principales posibles si existen varias posibilidades la que contenga el mayor nº de principales y secundarios .*

A continuación se numeran los átomos de carbono de la cadena principal COMENZANDO POR EL EXTREMO DE LA CADENA QUE ASIGNE LOS LOCALIZADORES MÁS BAJOS A LOS GRUPOS FUNCIONALES, si existen varias posibilidades se seguirán los criterios del punto 1.1.1

¡¡¡¡ATENCIÓN!!!!

“Cuando un grupo funcional solo puede ir en los extremos de la cadena , se omite el localizador a la hora de nombrarlo, pero debemos saber que es el (1)”

CADENAS LATERALES. Grupos alquilo

Son el resultado de que un **alcano pierda un átomo de Hidrógeno**. Se nombran **sustituyendo**, en el nombre del alcano correspondiente, el sufijo **-ano por -ilo**. Si son cíclicos se antepone el prefijo ciclo-.

Si la cadena lateral esta a su vez ramificada el Carbono con localizador (1) es aquel que se encuentra directamente unido a la cadena principal. Las reglas de nomenclatura son las del punto 1.1.1

ORGANIZACIÓN DE LA INFORMACIÓN

Los localizadores	Partícula multiplicativa	Cadena lateral : radical alquilo	Nº de átomos de carbono de la cadena principal.
Se ponen todo los nº de los sustituyentes, aunque sean iguales	Di, tri, tetra, sec, terc.... (no se consideran al ordenar por orden alfabético), pero si iso, neo.il (ejem : butil, etil)	Met, et , prop, but , pent, hex, hept, octa

Si no existe ningún grupo funcional : las cadenas laterales se ordenan por orden alfabético, y para ello **no se tienen** en cuenta las partículas multiplicativas que puedan tener, di tri , etc.

(Los localizadores, nº separados por comas) (guión) (partícula multiplicativa + cadena lateral) **Nº de átomos de carbono de la cadena principal** + terminación -ano).

Si existen insaturaciones y grupo funcional.

(Los localizadores (nº) separados por comas) (guión) (partícula multiplicativa + radical alquilo) (guión) (localizador doble enlace) (guión) **Nº de átomos de carbono de la cadena principal** (partículas multiplicativas + EN) (localizador triple enlace) (guión) (partículas multiplicativas + INO) (guión) (localizador grupo funcional) (guión) (partículas multiplicativas + terminación grupo funcional).

Ejem: 5- etil – 3,5 –dimetil-4-hexen-1-in – 3,4- diol

Si existe grupo grupo funcional.

(Los localizadores (nº) separados por comas) (guión) (partícula multiplicativa + radical alquilo) (guión) (localizador del grupo funcional) (guión) **Nº de átomos de carbono de la cadena principal** + terminación del grupo funcional)

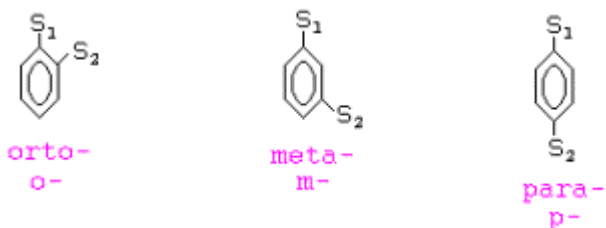
Ejem : 6- hidrox-5,5-dimetil-2-hexanona.

En general los números se separan por comas entre sí, mientras que los números de los nombres se separan por guiones. Los nombres no se separan.

HIDROCARBUROS AROMATICOS

Los **bencenos monosustituídos** se nombran anteponiendo el nombre del sustituyente a la palabra benceno.

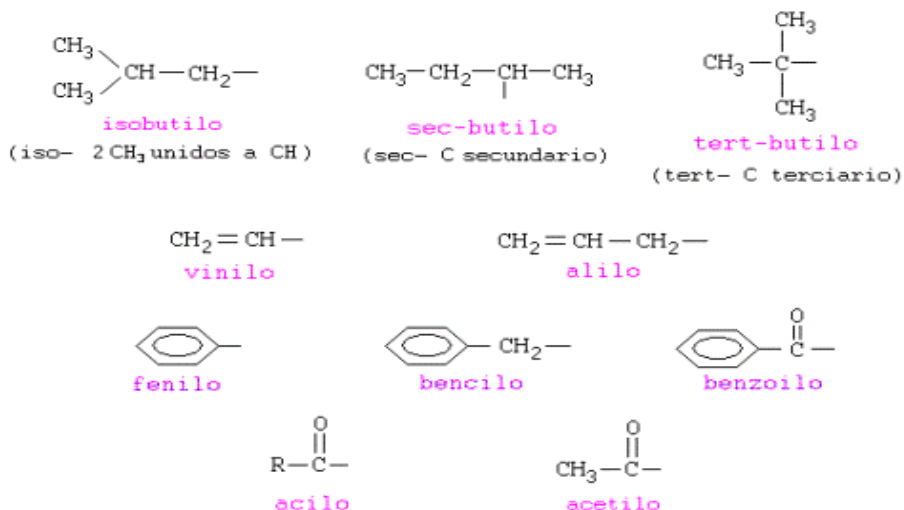
Los **bencenos disustituídos** se nombran anteponiendo el prefijo **orto, meta o para** y los nombres de los sustituyentes a la palabra benceno.



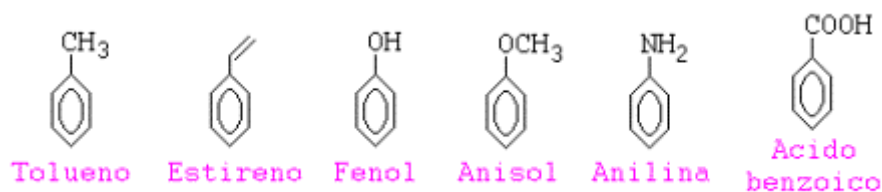
En los **bencenos trisustituídos o más** se numeran los carbonos de forma que tengan los **localizadores más bajos posibles** y se nombran teniendo en cuenta el orden alfabético.

Nombres no normalizados , Aceptados por la IUPAC

Radicales



Derivados del Benceno



ANEXO :Grupos funcionales más importantes

Grupo funcional es el átomo o grupo de átomos que define la estructura de una familia particular de compuestos orgánicos y al mismo tiempo determina sus propiedades.

Para cada una de las siguientes familias se señalan **en negrita** el grupo funcional.

Se representa con una R la parte alquílica (cadena de átomos de carbono).

EJEMPLO	FAMILIA	GRUPO FUNCIONAL
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	ALCANOS	R- CH-CH- R'
$\text{CH}_3\text{-CH=CH-CH}_3$	ALQUENOS	R- CH=CH- R'
$\text{CH}_3\text{-C} \equiv \text{C-CH}_3$	ALQUINOS	R - C \equiv C-R'
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$	ALCOHOLES	R- OH
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-Br}$	HALOGENUROS DE ALQUILO X (F, Cl, Br, I)	R- X
$\text{CH}_3\text{-O-CH}_2\text{-CH}_3$	ÉTERES	R- O -R'
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHO}$	ALDEHIDOS	R- CHO
$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$	CETONAS	R- CO -R'
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COOH}$	ÁCIDOS	R- COOH
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-COO-CH}_3$	ÉSTERES	R- COOR '

Una vez reconocidos los grupos funcionales que contiene una molécula hay que determinar cuál es la función principal, según el siguiente orden:

Orden de prioridad

- 1.- Ácidos (**carboxílicos** > sulfónicos)
- 2.- Derivados de ácidos (anhídridos > **ésteres** > haluros de acilo > amidas > nitrilos)
- 3.- **Aldehídos** > **cetonas**
- 4.- **Alcoholes** > **fenoles** > **tioles**
- 5.- Aminas
- 6.- **Éteres** > tioéteres
- 7.- Alquenos > alquinos (a igualdad de condiciones) Son ENINOS

Basado en los apuntes recogidos en: <http://personal.us.es/florido/fororg/nomen.htm>