

QUÍMICA ORGÁNICA

Rafael Jiménez Prieto
www.lamanzanadenewton.com

REGLAS DE FORMULACIÓN



www.lamanzanadenewton.com
www.lamanzanadenewton.com

FORMULACIÓN ORGÁNICA

Existen millones de compuestos orgánicos, y cada día se registran nuevas incorporaciones a la larga lista. Asignar a cada uno de ellos un nombre parece una tarea ardua.

Sin embargo, con ayuda de unas pocas reglas es posible nombrar cada compuesto orgánico, proporcionando a la vez una completa información sobre su estructura plana.

Prefijos para indicar el nº de átomos de carbono.	
<u>Prefijo</u>	<u>Nº de carbonos</u>
met-	1
et-	2
prop-	3
but-	4
pent-	5
hex-	6
hept-	7
oct-	8
non-	9
dec-	10

Para ello, la IUPAC ha establecido un sistema basado en el uso de prefijos numerales, que indican el número de átomos de carbono, y sufijos, para señalar los grupos funcionales que contiene. Observa algunos de ellos en la tabla.

Sufijos para diferenciar de qué compuesto se trata.	
<u>Sufijo</u>	<u>Tipo de compuesto</u>
-ano	alcano
-eno	alqueno
-ino	alquino
-ol	alcohol
-al	aldehído
-ona	cetona
-oico	Ácido carboxílico
-amina	amina
-amida	amida
-nitrilo	nitrilo

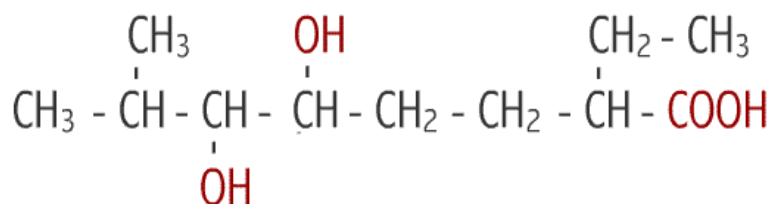
Paralelamente a las reglas que vamos a estudiar, se usan ampliamente una gran cantidad de nombres vulgares para otros tantos compuestos orgánicos, sobre todo en el ámbito farmacológico y biológico.

Consideraciones generales

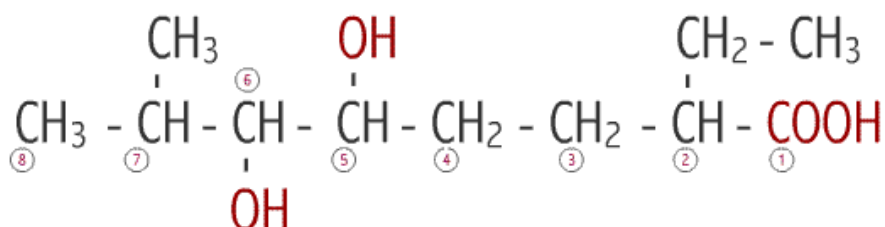
Un compuesto orgánico alicíclico, es decir, de cadena abierta, consiste en una cadena de átomos de carbono, los cuales soportan cadenas carbonadas más o menos cortas y grupos funcionales diversos; un compuesto cíclico estará constituido por uno o varios anillos carbonados, a los cuales se enlazarán asimismo cadenas u otros grupos funcionales.

La variedad de posibilidades es enorme, como sabemos. Incluso atendiendo a las reglas que se verán a continuación, en numerosas ocasiones hay más de una posibilidad para nombrar un compuesto. Todas serán válidas siempre que describan inequívocamente la estructura del compuesto de que se trate.

Si bien hay algunos aspectos puntuales a tener en cuenta para cada grupo funcional en concreto, como veremos con posterioridad, la nomenclatura sistemática de compuestos orgánicos se basa en la aplicación de unas sencillas reglas que ilustramos con un ejemplo. Supongamos que queremos nombrar este compuesto:

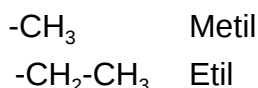


1. Al tratarse de una estructura ramificada, debemos elegir primero cuál será nuestra cadena principal. Esta será la más larga, que contenga a su vez el o los grupos funcionales principales; en dicha cadena, los carbonos se numerarán comenzando por el grupo funcional terminal.



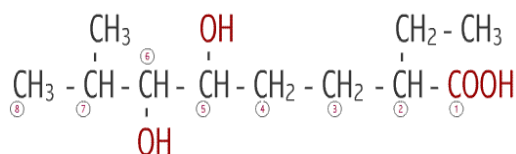
2. La cadena principal es de 8 átomos de carbono; ello nos indica que elegiremos el prefijo **oct-**. En cuanto a los grupos funcionales, el principal es el ácido, sobre el carbono 1. Por ello, el nombre del compuesto comenzará con “ácido” y terminará con el sufijo “-oico”. También hay dos grupos alcohólicos, sobre los carbonos 5 y 6. Para designarlos, al tener ya fijada la terminación -oico, utilizaremos el prefijo “hidroxi-”, que sustituye al sufijo “-ol”.

3. Por otra parte, los carbonos 2 y 7 soportan ramificaciones hidrocarbonadas, que se nombran uniendo el prefijo que indica el nº de átomos de carbono y la terminación “-il”.

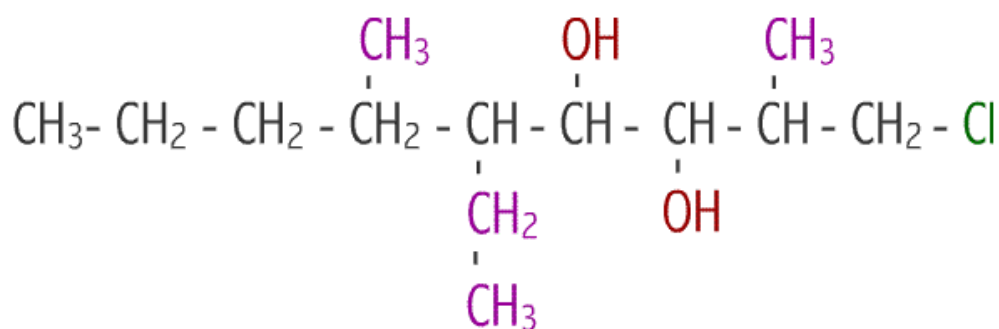


4. Teniendo en cuenta todo lo anterior, el compuesto en cuestión será:

ácido 2-etil-7-metil-5,6-dihidroxi octanoico



Observa este otro ejemplo:



1-cloro-5-etil-2,6-dimetil-3,4-nonanodiol

HIDROCARBUROS

Son compuestos constituidos únicamente por carbono e hidrógeno. Pueden ser **saturados**, si los átomos de carbono están unidos con cuatro enlaces covalentes simples a otros tantos átomos de carbono o de hidrógeno, o **insaturados**, si existen dobles o triples enlaces carbono-carbono en la estructura. También se puede distinguir entre **lineales** (de cadena abierta) o **cíclicos** (que presentan anillos en su estructura). A su vez, dentro de los cíclicos, se distingue entre **alifáticos** y **aromáticos**, según la existencia o no de dobles enlaces conjugados.

Para nombrar los hidrocarburos, se busca la cadena carbonada más larga que contenga las insaturaciones (en caso de que existan), y se numera comenzando por el extremo más próximo a éstas. En el caso de que se trate de un hidrocarburo saturado, que no contiene ni dobles ni triples enlaces, se numera de modo que los sustituyentes queden identificados con los **números más pequeños posibles**.

Las ramificaciones se nombran precedidas de un número que indica el carbono en el que se localizan, seguido del nombre característico de las mismas pero terminado en **-il**. Si hay varias, se nombrarán por orden alfabético.

Hidrocarburos saturados o alcanos ($\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$)

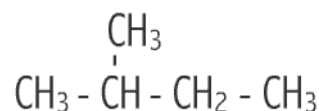
Se nombran con el prefijo que indica el nº de átomos de carbono en la cadena y el sufijo **-ano** que indica que es un alcano.



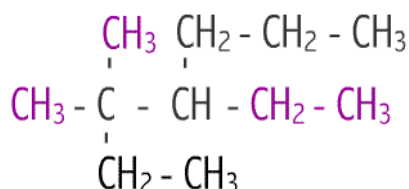
Propano



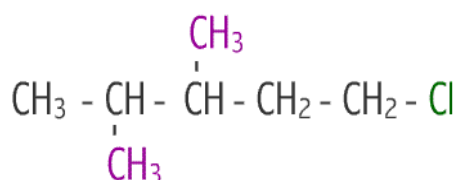
Pentano



2-metilbutano



4-etil-3,3-dimetilheptano



1-cloro-3,4-dimetilpentano

Hidrocarburos insaturados: alquenos (C_nH_{2n})

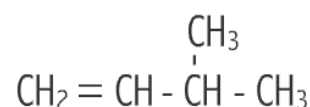
Contienen al menos 1 doble enlace. Se indica con un número su posición y con la terminación **-eno** que se trata de un alqueno. Si hay más de 1 doble enlace se emplearán los sufijos **-dieno**, **-trieno**, etc.



1-buteno



1,3-pentadieno



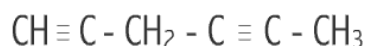
3-metil-1-buteno

Hidrocarburos insaturados: alquinos ($\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$)

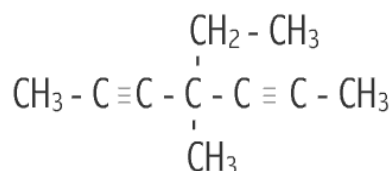
Se nombran de modo similar a los alquenos pero empleando la terminación **-ino**, propia de estos compuestos.



1-butino



1,4-hexadiino

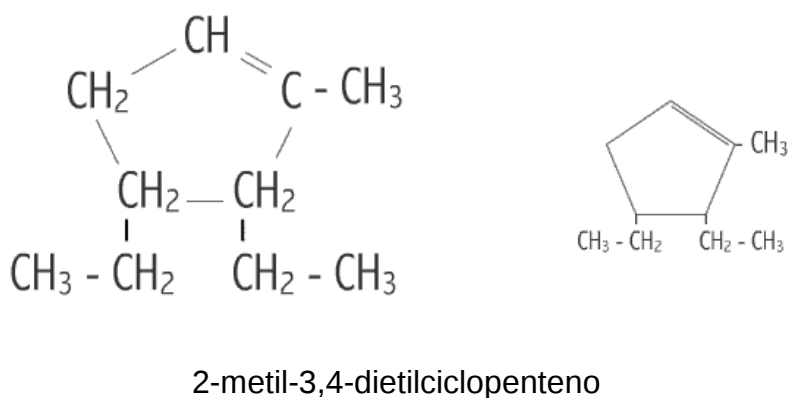
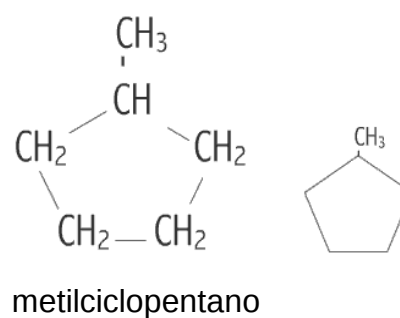
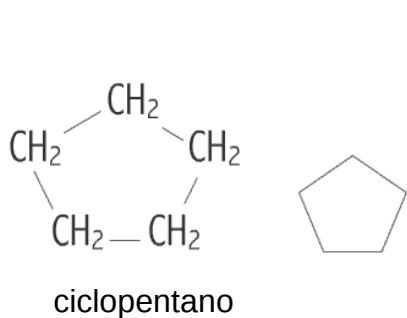


4-etil-4-metil-2,5-heptadiino

Hidrocarburos cíclicos

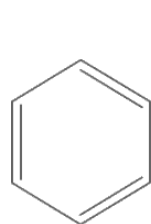
Se indica que se trata de un anillo con el prefijo **ciclo-** y se numeran los carbonos de modo que, si hay dobles o tripes enlaces, queden indicados con los números más

pequeños posibles.

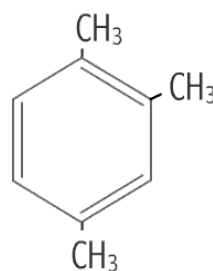


Hidrocarburos aromáticos: Derivados bencénicos

Se numeran los carbonos del benceno siguiendo la regla habitual de asignar los números más bajos a los átomos que soportan los sustituyentes y se nombran éstos seguidos de la palabra **benceno**.

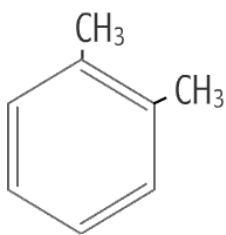


Benceno

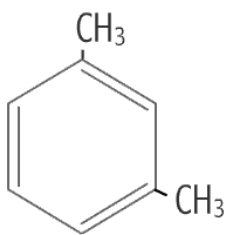


1,2,4-trimetilbenceno

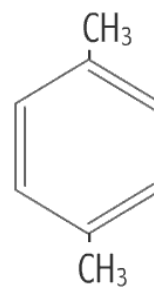
Si hay sólo dos sustituyentes, se pueden indicar con los prefijos **orto-** (o-), **meta-** (m-) y **para-** (p-), según estén contiguos o separados por uno o dos carbonos:



o-dimetilbenceno

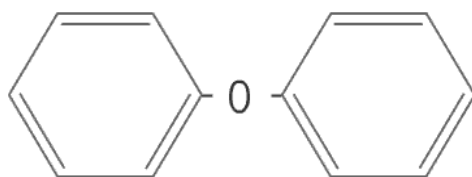


m-dimetilbenceno

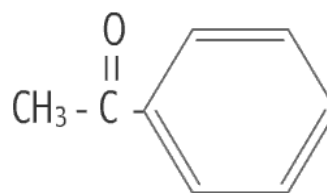


p-dimetilbenceno

Si el benceno actúa como sustituyente, se nombra como **fenil** ($\text{-C}_6\text{H}_5$).



difeniléter



metilfenilcetona

COMPUESTOS OXIGENADOS

Se entiende por tales aquellos compuestos orgánicos que, además de carbono e hidrógeno, contienen oxígeno. La presencia de este elemento da lugar a distintos grupos funcionales en función de las diferentes formas de combinarse tanto con el carbono como con el hidrógeno; de ellos podemos destacar los siguientes:

R **Alcoholes:** El oxígeno se une con sendos enlaces covalentes simples a un átomo de carbono y a un átomo de hidrógeno.

R **Éteres:** En este caso el oxígeno se une con enlaces covalentes simples a otros dos átomos, ambos de carbono.

R **Aldehídos y cetonas:** Presentan el grupo carbonilo, en el que se observa un enlace covalente doble carbono-oxígeno. Si el carbono de este grupo carbonilo se encuentra enlazado con enlaces covalentes a otros dos átomos de carbono, el compuesto resultante es una cetona; pero si al menos una de estas uniones se establece con un átomo de hidrógeno, nos encontramos frente a un aldehído.

Según lo anterior, es evidente que el grupo aldehído siempre se va a localizar en el extremo de la cadena carbonada, mientras que un grupo cetona siempre se encuentra en el interior.

R **Ácidos carboxílicos y ésteres:** En ambos casos se presenta el grupo funcional $R-COO-R'$ en el que el átomo de carbono se encuentra unido a dos átomos de oxígeno mediante enlaces covalentes doble y simple, respectivamente.

La diferencia entre ambos compuestos radica en la naturaleza del grupo $-R'$ unido al oxígeno. Si se trata simplemente de un átomo de hidrógeno, tenemos un ácido carboxílico, pero, si el grupo $-R'$ es un grupo alquílico, entonces se trata de un éster.

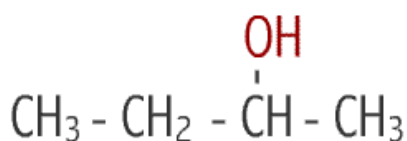
Como ocurría para los aldehídos, se observa que en los ácidos carboxílicos el grupo carboxilo ($-COOH$) es terminal, localizándose en el extremo de la cadena, mientras que en los ésteres no es así.

--- (---

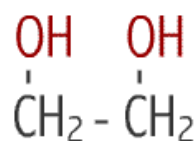
Tanto en los aldehídos como en los ácidos carboxílicos, compuestos en los que el grupo funcional se localiza en el extremo de la cadena, se numerarán los carbonos comenzando por el mismo.

Alcoholes (R-OH)

Se nombra la cadena hidrocarbonada con la terminación **-ol**, anteponiendo un número que indica la posición del grupo alcohólico.

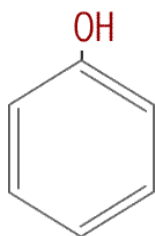


2-butanol

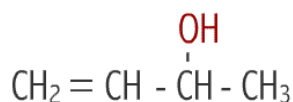


1,2-etanodiol

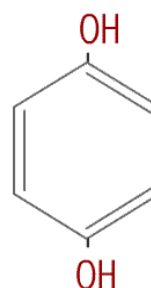
Otra forma de nombrarlos es indicar la presencia de la función alcohólica con el prefijo **hidroxi-**



Hidroxibenceno o fenol



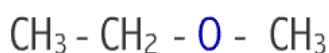
3-hidroxi-1-buteno



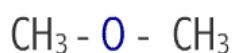
o-dihidroxibenceno

Éteres (R-O-R')

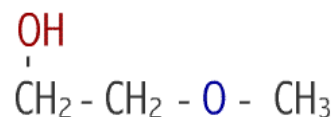
Se nombran los dos sustituyentes alquílicos seguidos de la palabra **éter**.



etilmetiléter



dimetiléter



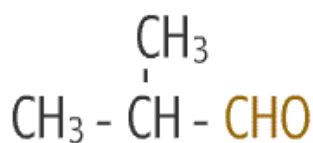
(2-hidroxietil)metiléter

Aldehídos (R-CHO)

La terminación **-al** indica la presencia de este grupo funcional en un compuesto orgánico. A veces se utiliza la terminación **-aldehído**.



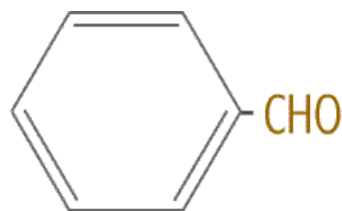
Propanal



2-metilpropanal



3-hidroxibutanal



Benzaldehído

Cetonas (R-CO-R')

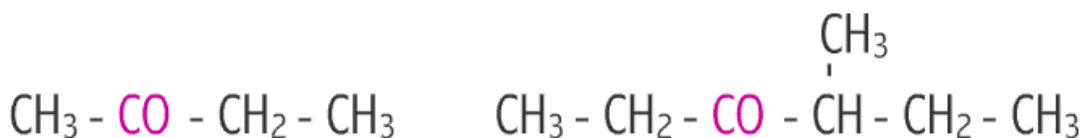
Se nombran los sustituyentes unidos al grupo carbonilo seguidos de la palabra **cetona**. También pueden nombrarse con la terminación **-ona**.



dimetilcetona
(acetona)



metilpropilcetona

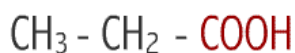


2-butanona

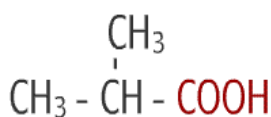
4-metil-3-hexanona

Ácidos carboxílicos (R-COOH)

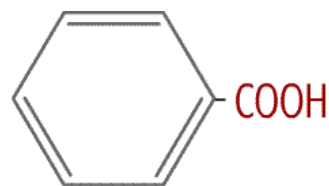
Se antepone la palabra ácido al nombre del compuesto, que tendrá a su vez la terminación **-oico**, indicativa de la existencia del grupo carboxílico.



ácido propanoico



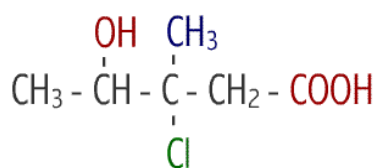
ácido 2-metilpropanoico



ácido benzoico



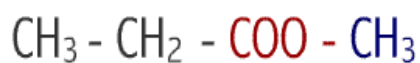
ácido propanodioico



ácido 3-cloro-4-hidroxi-3-metilpentanoico

Ésteres (R-COO-R')

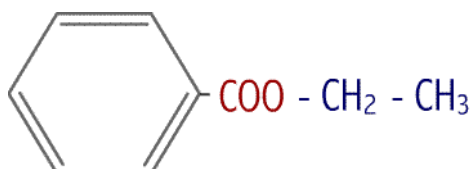
Se nombra el anión del ácido carboxílico que da origen al éster terminado en **-ato** seguido del nombre del grupo alquilo unido al oxígeno del grupo hidróxido con la terminación **-ilo**.



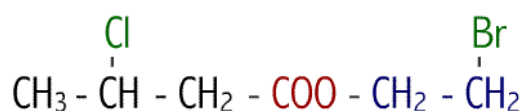
propanoato de metilo



etanoato de propilo



Benzoato de etilo



3-clorobutanoato de 2-bromoetilo

COMPUESTOS NITROGENADOS

El nitrógeno puede aparecer también formando parte de los compuestos orgánicos dando lugar a distintos grupos funcionales según la forma de combinarse con el carbono y otros elementos. Entre los más importantes podemos destacar:

R **Aminas:** El nitrógeno aparece unido con enlaces covalentes simples a átomos de carbono y/o de hidrógeno. De este modo resultan las aminas primarias, secundarias y terciarias:

- ú Primaria - Unido a un átomo de carbono y dos de hidrógeno ($R-NH_2$)
- ú Secundaria - Unido a dos átomos de carbono y uno de hidrógeno ($R-NH-R'$)
- ú Terciaria - Unido a tres átomos de carbono ($R-N-R''$)

R **Amidas:** El grupo amida ($-C(=O)-NH-$) está caracterizado por presentar un átomo de nitrógeno unido a un grupo carbonilo mediante un enlace covalente simple. Por analogía con las aminas, las amidas pueden ser primarias ($R-CO-NH_2$), secundarias ($R-CO-NH-R'$) y terciarias ($R-CO-N-R''$).

R **Nitrilos:** Se caracteriza por la presencia de un grupo ciano ($-CN$), formado por un átomo de nitrógeno unido a un átomo de carbono mediante un enlace covalente triple. El átomo de carbono se une a su vez a una cadena carbonada mediante un enlace simple ($R-C \equiv N$).

R **Nitroderivados:** Presentan en su estructura el grupo nitro ($-NO_2$), en el cual el átomo de nitrógeno se encuentra en su estado de oxidación más alto (+5).

--- (---

Aminas

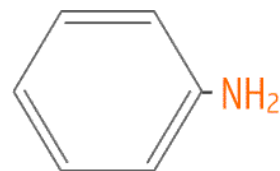
Incluyen el grupo amino. Ya sean primarias, secundarias o terciarias, en todos los casos se nombrarán los sustituyentes seguidos de la palabra **amina**. Si hay varios grupos alquilo se considerará el mayor como fundamental, y situaremos delante de los otros la letra **N-**, indicativa de que están enlazados al nitrógeno.



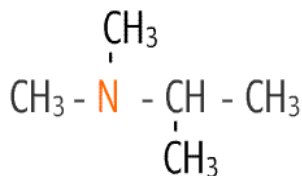
metilamina



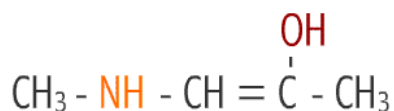
N-etilmetilamina



Fenilamina o anilina



N,N-dimetil-2-propilamina



N-metil-(2-hidroxi-1-propenil)amina

Amidas

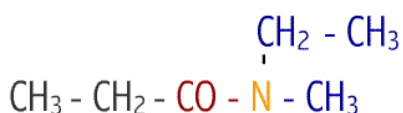
Se nombran indicando los sustituyentes seguidos de la palabra **amida**. Por lo demás, siguen las mismas reglas que en el caso de las aminas.



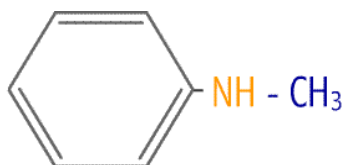
Etanoamida



N-metiletanoamida



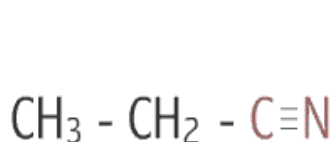
N-etil-N-metilpropanoamida



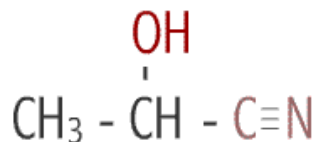
N-metilbenzamida

Nitrilos

Se nombra la cadena carbonada a la que se encuentra unido el grupo seguido de la palabra **nitrilo**.

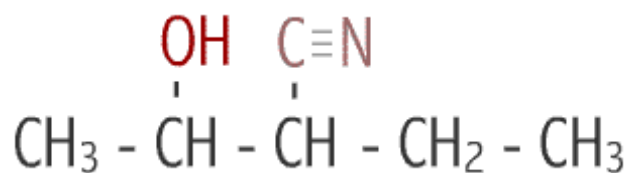


propanonitrilo



2-hidroxipropanonitrilo

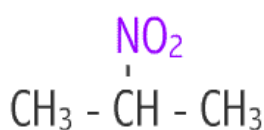
Si actúa como sustituyente lo nombraremos como **ciano-**



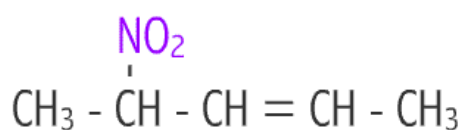
2-hidroxi-3-cianopentano

Nitroderivados

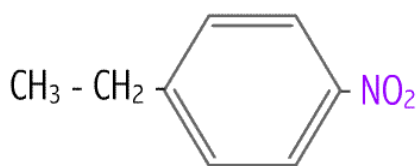
Se indica en el nombre del compuesto la presencia del grupo **nitro** empleando esta denominación y un número que indique su posición en la cadena carbonada.



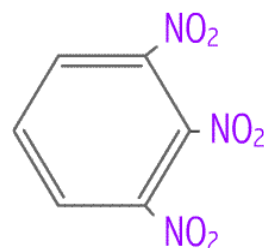
2-nitropropano



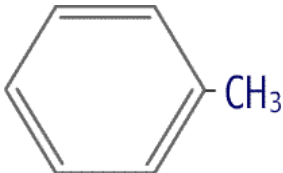
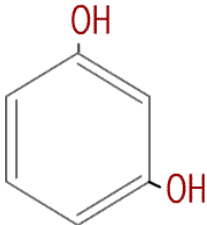
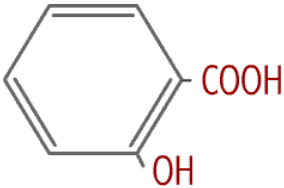
4-nitro-2-penteno

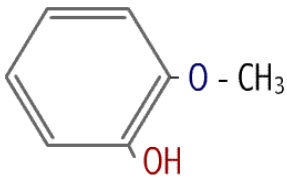
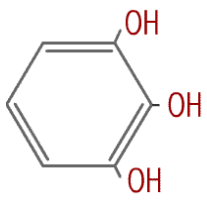
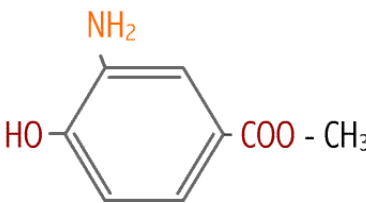
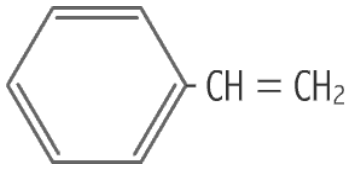
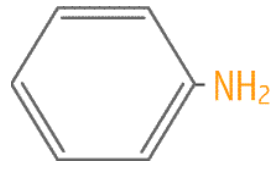


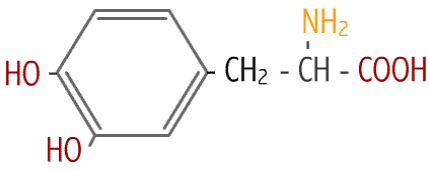
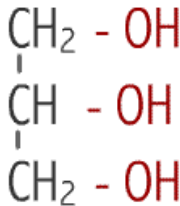
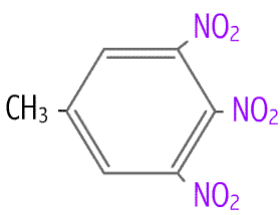
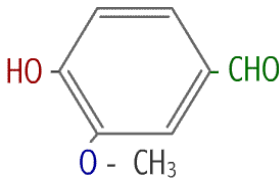
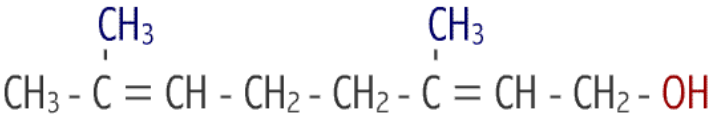
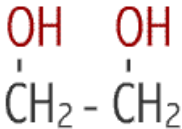
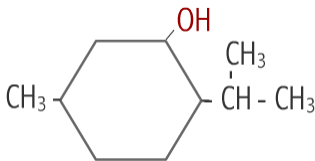
p-nitroetilbenceno



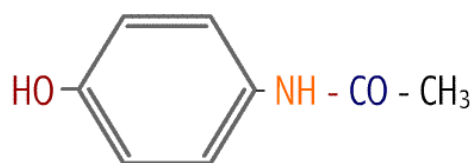
1,2,3-trinitrobenceno

Etanol $\text{CH}_3 - \text{CH}_2\text{OH}$ Alcohol etílico -Bebidas alcohólicas-	Ácido etanoico $\text{CH}_3 - \text{COOH}$ Ácido acético -Vinagre-
Dimetilcetona $\text{CH}_3 - \text{CO} - \text{CH}_3$ Acetona -Disolvente-	Ácido 2-hidroxiopropanoico $\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{COOH} \end{array}$ Acido láctico -Leche-
Metano CH_4 Gas natural o gas grisú -Gas inflamable-	Ácido metanoico HCOOH Acido fórmico -Irritante hormiga roja y ortigas-
Metilbenceno  Tolueno -Disolvente pinturas-	m-hidroxifenol  Resorcinol -Medicamentos-
Ácido o-hidroxibenzoico  Acido salicílico -Medicamentos-	Ácido 4-metil-2-aminopentanoico $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \qquad \text{NH}_2 \\ \qquad \quad \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COOH} \end{array}$ Leucina -Aminoacido-

o-metoxifenol  Cresol Desinfectante	Ácido butanoico $\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{COOH}$ Ácido butírico -Olor de la mantequilla rancia-
Ácido 3,4,5-trihidroxibenzoico  Ácido gálico -Antioxidante bebidas alcohólicas-	Ácido 3-hidroxi-3carboxipentanodioico $\begin{array}{c} \text{CH}_2 - \text{COOH} \\ \\ \text{HO} - \text{C} - \text{COOH} \\ \\ \text{CH}_2 - \text{COOH} \end{array}$ Ácido cítrico -Cítricos-
Ácido 9-octadecenoico  Ácido oleico -Aceite de oliva-	
2,3,4,5,6-pentahidroxihexanal $\text{HO} - \text{CH}_2 - \overset{\text{OH}}{\underset{ }{\text{CH}}} - \underset{\text{OH}}{\underset{ }{\text{CH}}} - \overset{\text{OH}}{\underset{ }{\text{CH}}} - \text{CHO}$ Glucosa -Glúcido-	3-amino-4hidroxibenzoato de metilo  Ortocaína -Anestésico superficial-
Etenilbenceno  Estireno -Precursor de polímeros-	Aminobenceno  Anilina -Colorante - Precursor sulfonamidas-

Ácido 3-(3,4-dihidroxifenil)-2aminopropanoico  L-Dopa -Fármaco tratamiento del Parkinson-	1,2,3-propanotriol  Glicerina -Formación de ésteres-	
Trinitrotolueno  TNT -Explosivos-	3-metoxi-p-hidroxibenzaldehído  Vainillina -Aroma de vainilla-	
1-hidroxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno  Geraniol -Aceite de geranio-		
Etanodiol  Glicol -Anticongelante-	2-isopropil-5-metilciclohexanol  Mentol -Menta-	
Triclorofluorometano CFCI₃ Freón 11	Clorotrifluorometano CF₃Cl Freón 13	Tetrafluorometano CF₄ Freón 14
-Propulsores envases a presión-		

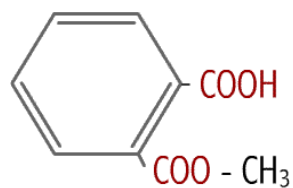
N-(4-hidroxifenil)etanoamida



Paracetamol

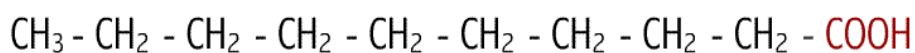
-Medicamento-

Ácido o-acetoxibenzoico



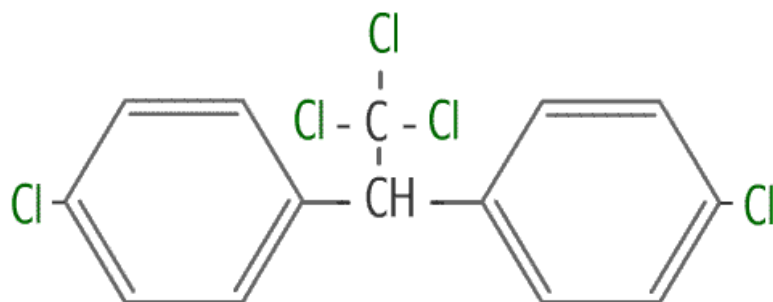
Aspirina
-Medicamento-

Ácido decanoico



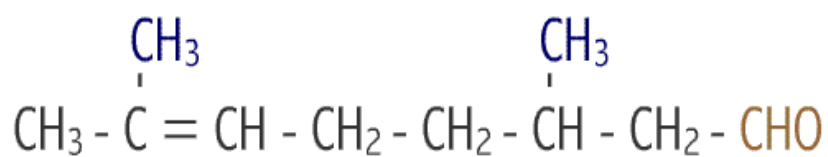
Ácido cáprico
-Olor a cabra-

1,1,1-tricloro-2,2-bis(p-clorofenil)etano



DDT
-Pesticida-

3,7-dimetil-6-octenal



Citronelal
-Responsable del aroma del aceite de limón-