

FORMULACIÓN Y NOMENCLAURA ORGÁNICA**1 CONCEPTOS GENERALES.****1.1 COMPUESTOS ORGÁNICOS.**

Los compuestos orgánicos se caracterizan porque en ellos está presente el átomo de carbono. Existe un número tremendamente elevado de compuestos orgánicos, y ello se debe a la facilidad del átomo de carbono para formar enlaces con otros átomos de carbono o de otros elementos. La valencia del carbono es 4 por lo que puede formar hasta cuatro enlaces simples.

1.2 SUSTITUYENTES.

Son cada uno de los átomos o grupos de átomos que se unen formando enlace con un átomo de carbono.

1.3 GRUPO FUNCIONAL.

Es el átomo o grupo de átomos que confiere características peculiares a todas las moléculas que lo contienen.

1.4 TIPOS DE ÁTOMOS DE CARBONO.

Dependiendo del número de átomos de carbono que se unen a uno dado, los carbonos pueden ser:

- Primario.* Sólo enlaza con otro átomo de carbono. El resto de enlaces se producen con otros elementos.
- Secundario.* El átomo de carbono enlaza con otros 2 átomos de carbono.
- Terciario.* Unido a otros 3 átomos de C.
- Cuaternario.* Unido a otros 4 átomos de C.

1.5 CADENA O ESQUELETO CARBONADO.

La cadena carbonada de un compuesto orgánico está formado por la serie de átomos de C unidos entre sí, que originan dicho compuesto. Hay varios tipos de cadenas carbonadas:

- *Cadenas acíclicas o abiertas.* La cadena tiene extremos reconocibles.
- *Cadenas cíclicas o cerradas.* No existen extremos en la cadena, los átomos forman ciclos.

1.6 FÓRMULAS QUÍMICAS. TIPOS DE FÓRMULAS.

Una fórmula es una combinación de símbolos y subíndices que indican los componentes de una sustancia y sus proporciones atómicas.

Existen distintos tipos de fórmulas:

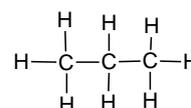
- *Fórmula empírica:* Indica la proporción de los elementos según los números enteros más sencillos.
- *Fórmula molecular:* Número real de átomos que forman la molécula o unidad estructural mínima de un compuesto.

Ejemplo:

La fórmula empírica: $(CH)_n$ corresponde a las fórmulas moleculares: C_2H_2 (Acetileno) C_6H_6 (Benceno)

Las fórmulas moleculares pueden explicitarse más o menos. De acuerdo con este criterio podemos citar:

- *Fórmula desarrollada.* Se indican explícitamente todos los enlaces entre átomos. Existen algunos tipos de fórmulas desarrolladas en las que se indica la disposición espacial de los átomos (fórmulas estructurales). Ejemplo:



- *Fórmula semidesarrollada.* Se indican sólo los enlaces entre carbonos, el resto de enlaces no se expresa de forma explícita. Ejemplo: $CH_3-CH_2-CH_3$.
- *Fórmula molecular condensada.* No se indica explícitamente ningún enlace. Ejemplos: C_3H_8

2 HIDROCARBUROS

2.1 HIDROCARBUROS SATURADOS (ALCANOS).

Son compuestos de carbono e hidrógeno que sólo presentan enlaces simples C-C y C-H. Todos ellos están formados por la repetición de carbonos centrales con 2 átomos de H y 3 átomos de hidrógeno en los carbonos primarios terminales, por lo que su **fórmula general es C_nH_{2n+2}** .

2.1.1 Hidrocarburos saturados lineales.

El esqueleto carbonado no presenta ninguna derivación en la cadena, existen dos extremos en los que hay carbonos primarios y el resto de la cadena son carbonos secundarios.

Nomenclatura:

Depende del número de átomos de C que tengan. Los cuatro primeros reciben nombres específicos:

CH_4	<i>Metano</i>
CH_3-CH_3	<i>Etano</i>
$CH_3-CH_2-CH_3$	<i>Propano</i>
$CH_3-CH_2-CH_2-CH_3$	<i>Butano</i>

Los demás se nombran añadiendo al prefijo griego que indica el número de átomos de C, la terminación -ano. (*Pentano, Hexano, Heptano, Octano, etc.*)

2.1.2 Radicales alquílicos.

Se originan cuando un alcano pierde uno de sus átomos de hidrógeno.

Nomenclatura:

Se nombran como el hidrocarburo de procedencia, sustituyendo la terminación -ANO por la terminación -ILO.

CH_3-	<i>Metilo</i>	CH_3-CH_2-	<i>Etilo</i>
---------	---------------	--------------	--------------

Cuando el radical forma parte de un compuesto se pierde la "o" final al nombrarlo (Por ejemplo, se dice *2-metil propano* y no *2-metilo propano*).

2.1.3 Hidrocarburos saturados ramificados.

Se originan cuando se produce la sustitución de un hidrógeno de un carbono secundario por un radical.

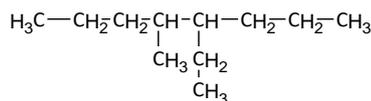
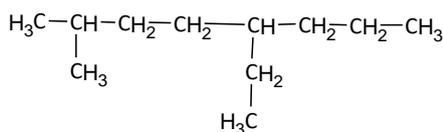
Nomenclatura:

Para nombrar estos compuestos, hay que seguir las siguientes normas:

1. Se elige la cadena principal, que será la de mayor longitud entre todas las posibles. (Ver punto 5 y siguientes si hay varias igual de largas).
2. Se numeran los átomos de C, de forma que, a los carbonos con sustituyentes, les correspondan los números (**localizadores**) más bajos posibles.
3. Se nombran los radicales sustituyentes por orden alfabético, indicando delante la posición que ocupan en la cadena. Si existieran varios sustituyentes iguales se utilizarían los prefijos griegos di-, tri-, tetra-,... indicando asimismo delante todos los localizadores que les correspondieran, pero estos prefijos no serían tenidos en cuenta a la hora de establecer el orden alfabético.
4. Se pone, por último, el nombre del hidrocarburo que corresponde a la cadena principal.
5. Si existieran varias cadenas de la misma longitud, se debe elegir la principal de acuerdo a los siguientes criterios:
 - a) La que disponga de mayor número de cadenas laterales.
 - b) Aquella que tenga los localizadores más bajos para los sustituyentes. Si por un extremo obtenemos un número más bajo para los localizadores (por ejemplo: 224 frente a 244) empezaremos por ese extremo.
 - c) Aquella que tenga el mayor número de átomos de C en las cadenas laterales más pequeñas.

d) La que tenga las cadenas laterales más pequeñas.

Ejemplos:

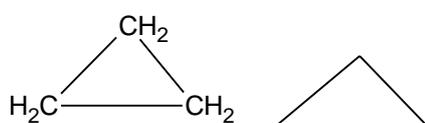


5-etil-2-metiloctano (no 2-metil-5-etiloctano) 4-etil-5-metiloctano (no 4-metil-5-etiloctano)

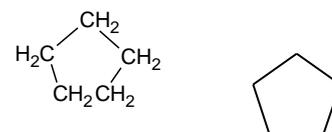
2.1.4 Hidrocarburos cíclicos.

Cuando la cadena lineal de un hidrocarburo se cierra, uniéndose entre sí los dos carbonos de los extremos con pérdida de un átomo de H de cada uno se origina un compuesto en forma de anillo. El compuesto formado es un hidrocarburo cíclico.

Se nombran anteponiendo el prefijo ciclo- al hidrocarburo lineal del mismo número de átomos de carbono del que proceden.



Ciclopropano



Ciclopentano

Se suelen representar como el polígono de igual número de lados que el de átomos de carbono de la molécula (cada vértice representa un átomo de C saturado de átomos de H).

Cuando estos compuestos pierden un átomo de hidrógeno, se convierten en radicales. Los criterios para nombrarlos son los mismos que se utilizan para hidrocarburos lineales.

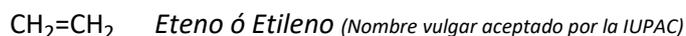
2.2 HIDROCARBUROS INSATURADOS.

Contienen enlaces dobles o triples entre C y C.

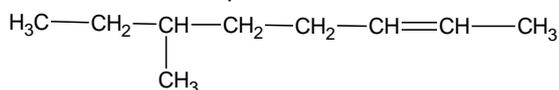
2.2.1 Alquenos.

Son hidrocarburos insaturados con un doble enlace C=C. para formar un enlace doble entre dos carbonos es necesario eliminar un hidrógeno de cada uno de ellos, por lo que la **fórmula general será C_nH_{2n}** (la misma que la de los cicloalcanos).

Se nombran como el hidrocarburo saturado del que proceden, cambiando la terminación "**-ano**" por "**-eno**". La posición del doble enlace se indica mediante un localizador, que tendrá el menor valor posible, para lo cual empezaremos a numerar la cadena por el extremo más próximo al doble enlace.



Si existieran ramificaciones, se tomaría como cadena principal la más larga que contenga al doble enlace. Éste tiene preferencia a la hora de numerar la cadena principal.



6-metil-2-octeno

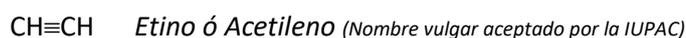
Cuando existe más de un doble enlace se utiliza la terminación -adieno, -atrieno, etc.

$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$ Propadieno

$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$ 1,2,4-pentatrieno

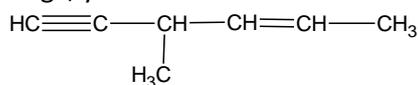
2.2.2 Alquinos.

Son hidrocarburos insaturados con un triple enlace carbono-carbono. ($\text{C}\equiv\text{C}$). Los criterios para nombrarlos son los mismos que para los alquenos, cambiando la terminación "**-eno**" por "**-ino**". **Su fórmula general será C_nH_{2n-2} .**

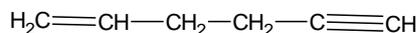


2.2.3 Hidrocarburos con dobles y triples enlaces.

Se nombran eligiendo los localizadores más bajos para las insaturaciones. Sólo si coincidieran los localizadores empezando por un extremo o por otro se daría preferencia al doble enlace frente al triple. Si existieran varias cadenas se elegiría la que tuviera más insaturaciones, a igualdad de insaturaciones la más larga, y si continuaran existiendo dos iguales se elegiría aquella que tuviera más dobles enlaces.



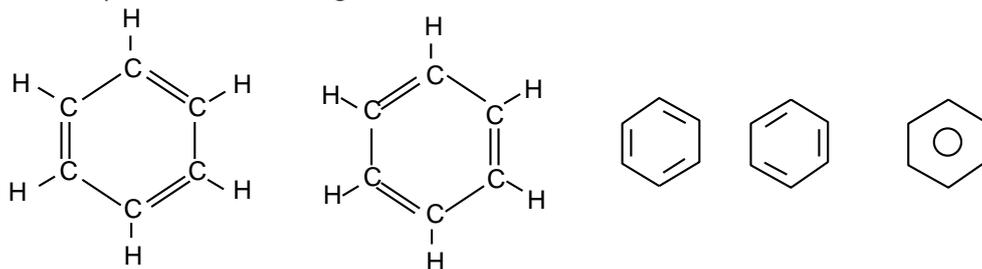
3-metil-4-hexen-1-ino



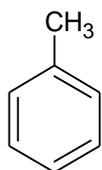
1-hexen-5-ino

2.2.4 Hidrocarburos aromáticos.

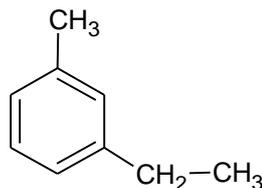
Derivan del benceno: hidrocarburo cíclico de 6 átomos de carbono con dobles enlaces alternados. Se suele representar con las siguientes formas:



Todas ellas son equivalentes entre sí. Cuando existe un sustituyente en el ciclo se nombra dicho sustituyente y después la palabra benceno. Si existiera más de un sustituyente, habría que numerar los carbonos, eligiendo siempre la combinación de localizadores más bajos posible.

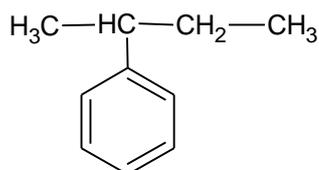


Metil benceno



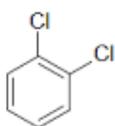
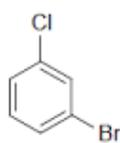
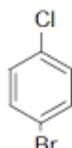
1-etil-3-metil benceno

Cuando el benceno forma parte de una cadena como sustituyente, el nombre que se le da al radical es el de fenilo:



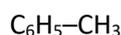
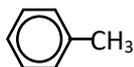
2-fenil butano

Cuando hay dos sustituyentes puede usarse **o(orto)** para 1-2, **m(meta)** para 1,3 y **p(para)** para 1,4:

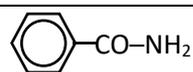
o-diclorobenceno
1,2-diclorobencenom-bromoclorobenceno
1-bromo-3-clorobencenop-bromoclorobenceno
1-bromo-4-clorobenceno

Algunos derivados del benceno con nombre propio:

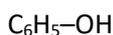
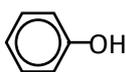
Estos compuestos se irán viendo a continuación y se escriben aquí a modo de resumen:



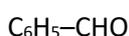
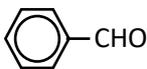
tolueno



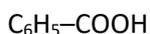
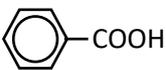
benzamida



fenol



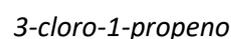
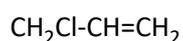
benzaldehído



ácido benzoico

3 DERIVADOS HALOGENADOS.

Son compuestos procedentes de la sustitución de un hidrógeno por un halógeno (F, Cl, Br, I) en un hidrocarburo. Para nombrarlos se antepone el nombre del halógeno (*fluor, cloro, bromo, yodo*) al del hidrocarburo, utilizando localizadores si es preciso.



4 DERIVADOS OXIGENADOS

Los veremos en orden de importancia. Cada grupo de los aquí estudiados es más importante que el anterior (aunque este curso eso dará lo mismo, pues no mezclaremos compuestos con distintos grupos funcionales).

4.1 ÉTERES.

Son compuestos formados por dos radicales unidos a un átomo de oxígeno.

Para nombrar a los éteres se utiliza el nombre de los dos radicales (por orden alfabético) y se termina con la palabra **éter** (*Esta nomenclatura está muy extendida y será la que usemos, pero no es la recomendada por la IUPAC al no haber en ella cadena principal*).

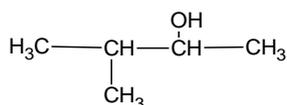
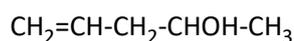
Otra forma de nombrar los éteres (nomenclatura sustitutiva usada por la IUPAC) es dar el nombre del radical más simple con la terminación **-oxi** y a continuación el nombre de la cadena principal:

	<u>Nomen.funcional</u>	<u>Nomen. sustitutiva</u>
CH ₃ -O-CH ₂ -CH ₃	<i>etil metil éter</i>	<i>metoxi etano</i>
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -O-CH ₂ -CH ₃	<i>etil propil éter</i>	<i>etoxi propano</i>

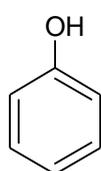
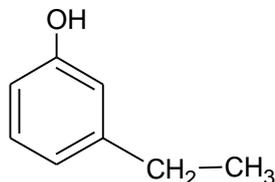
4.2 ALCOHOLES.

Los Alcoholes se obtienen cuando uno de los H de un hidrocarburo se sustituye por un grupo hidroxilo: -OH.

Los alcoholes se nombran añadiendo la terminación **"-ol"** al nombre del hidrocarburo de procedencia. Si es preciso indicarlo, se utiliza un localizador, que será el que asigne el número más bajo posible al carbono donde se encuentre el grupo OH, para ello el grupo OH tiene preferencia sobre los radicales y sobre las insaturaciones.

*3-metil-2-butanol**4-penten-2-ol*

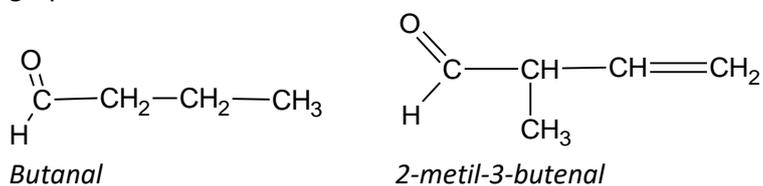
Si el grupo OH está como sustituyente en el anillo bencénico, el compuesto se denomina **fenol**. Ej.:

*Fenol**m-etil fenol*

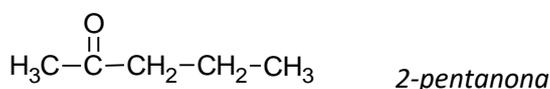
4.3 ALDEHÍDOS Y CETONAS.

Se caracterizan porque en su molécula contienen el **grupo carbonilo (C=O)**. La diferencia entre aldehídos y cetonas estriba en que en los aldehídos, el grupo **C=O** aparece en un carbono terminal de la cadena, mientras que en las cetonas aparece en un carbono intermedio.

Para nombrar los aldehídos (cuyo localizador será siempre 1 y por tanto no es necesario escribirlo) se sustituye la -o final del hidrocarburo por la terminación **-al**. Si en los dos extremos de la cadena existieran grupos C=O se utilizaría **-dial**.



En las cetonas debemos sustituir la -o final del hidrocarburo por la terminación **-ona**, indicando además su posición mediante el localizador si fuera preciso. Si existiera más de un grupo C=O se utilizarían las terminaciones **-diona**, **-triona**, etc.

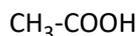


4.4 ÁCIDOS CARBOXÍLICOS.

Contienen el grupo carboxilo (-COOH) procedente de sustituir **en un carbono terminal uno de los hidrógenos por un grupo -OH y los dos restantes por un oxígeno =O**.

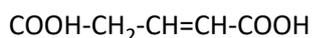
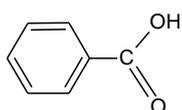
Se nombran sustituyendo la -o final del hidrocarburo por la terminación **-oico**. El grupo -COOH tiene preferencia sobre todos los anteriormente estudiados.

Muchos ácidos tienen nombres no sistemáticos que están aceptados por la IUPAC



ácido metanoico (ácido fórmico)

ácido etanoico (ácido acético)



ácido benzoico

ácido 2-pentenodioico

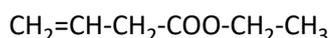
4.5 ÉSTERES.

Se pueden considerar derivados de los ácidos en los que se sustituye el hidrógeno del grupo carboxilo por un radical.

Para nombrarlos, se sustituye la terminación -ico del ácido correspondiente por la terminación **-ato** y después se indica el nombre del radical.



etanoato de metilo (acetato de metilo)



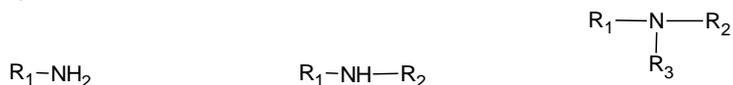
3-butenato de etilo

5 COMPUESTOS NITROGENADOS.

5.1 AMINAS

Se pueden considerar derivados del amoniaco (NH_3) en el que se sustituyen 1, 2 o los 3 átomos de hidrógeno por un radical. Se llaman respectivamente **primarias**, **secundarias y terciarias**. Quizás es más sencillo entender que las **primarias** se forman por sustitución de un H por un NH_2 -, las **secundarias** a partir de las primarias por sustitución de un H del NH_2 por otro radical hidrocarbonado (por tanto, quedarán con R-NH-

R') y las **terciarias** por sustitución del H del NH de una secundaria por otro radical hidrocarbonado. Se quedarían así:



Aminas primarias *Aminas secundarias* *Aminas terciarias*

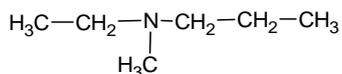
En la nomenclatura no IUPAC, que es la más sencilla, se nombran los distintos radicales que tiene la amina y se termina con la palabra "amina". No es recomendada por la IUPAC puesto que no hay cadena principal de carbonos.

En la nomenclatura IUPAC se elige la cadena principal (la de carbonos más larga), se indica donde está la amina con la terminación "**amina**" y todas las cadenas que estén unidas al nitrógeno (si son secundarias o terciarias) se nombran usando el localizador **N**. Ejemplos:



1-etanamina (*etil amina en la no IUPAC*)

N-metil 1-metanamina (*dimetilamina en la no IUPAC*)



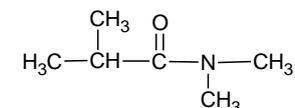
N-etil-N-metil 1-propanamina (*o metil etil propil amina en la no IUPAC*)

5.2 AMIDAS.

Se pueden considerar derivadas de la sustitución del grupo -OH en un ácido por el grupo NH₂. Se nombran sustituyendo la terminación -oico del ácido por -amida.



También pueden ser secundarias y terciarias:



N,N-dimetil-2-metil-propanamida

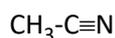
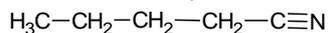
N-etil etanamida

(observa la diferencia entre N-metil y 2-metil)

5.3 NITRILOS.

En su molécula existe el grupo -C≡N. En ocasiones se consideran derivados del ácido cianhídrico H-C≡N.

La IUPAC recomienda que se nombren añadiendo el sufijo **-nitrilo** al nombre del hidrocarburo con igual número de átomos de C (ojo que el carbono del C≡N también cuenta). También se pueden considerar como derivados del ácido cianhídrico nombrándose como cianuro de (nombre del radical que se une a -C≡N. En este caso el C del triple enlace está incluido en la palabra cianuro y no estará en la del radical).

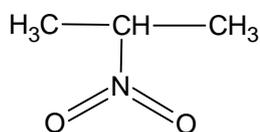


pentanonitrilo ó cianuro de butilo

etanonitrilo (cianuro de metilo)

5.4 NITROCOMPUESTOS.

Son compuestos en los que figura el grupo NO₂ (nitro). Se nombran anteponiendo este prefijo al nombre del hidrocarburo en cuestión, utilizando el localizador correspondiente en caso de ser necesario.



2-nitropropano

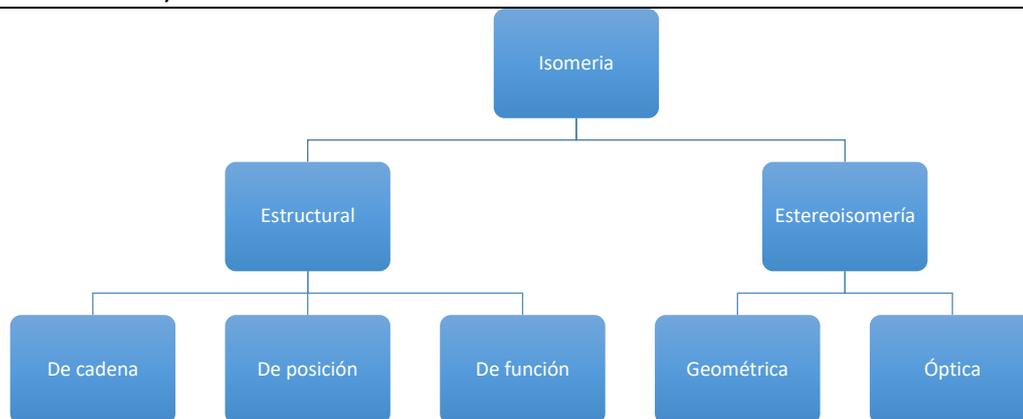
RESUMEN DE LOS GRUPOS FUNCIONALES

<i>Función</i>	<i>Fórmula general</i>	<i>Sufijo</i> (o prefijo)	<i>Ejemplo</i>
Hidrocarburos saturados	R-R'	-ano (-ilo en radical)	CH ₃ -CH ₃ (etano)
Hidrocarburos insaturados	R=R' R≡R'	-eno (-enilo en radical) -ino (-inilo en radical)	CH ₂ =CH ₂ (eteno, etileno) CH≡CH (etino, acetileno)
Derivados halogenados	R-X	Fluor, cloro, bromo, yodo	ClCH ₂ -CH ₂ Cl (1,2-dicloro etano)
Nitroderivados	R-NO ₂	(PREFIJO) nitro-	NO ₂ CH ₂ -CH ₃ (1-nitro etano)
Éter	R-O-R'	-oxi-	CH ₃ -O-CH ₂ -CH ₃ (metoxi metano o dimetil éter)
Alcohol	R-OH	-ol	CH ₃ -CH ₂ OH (etanol)
Aldehido	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$	-al	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$ (etanal)
Cetona	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{R}'$	-ona	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_3$ (propanona)
Ácido	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$	-oico	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$ (Ácido etanoico o ácido acético)
Éster	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{R}'$	-oato de (R)ilo	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_3$ (etanoato de metilo)
Amida	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}_2$	-amida	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}_2$ (etanamida)
Amina	R-NH ₂	-amina	CH ₃ -CH ₂ -NH ₂ (etanamina o etilamina)
Nitrilo	R-C≡N	-nitrilo	CH ₃ -C≡N (etanonitrilo)

6 ISOMERÍA

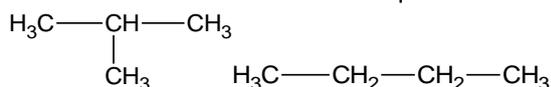
En Química Orgánica es muy frecuente que una única fórmula condensada, corresponda a diferentes compuestos (diferentes fórmulas estructurales). Los compuestos que presentan esta propiedad (diferente fórmula estructural y la misma fórmula condensada) se llaman isómeros y el fenómeno se denomina **isomería**.

Existen básicamente 2 tipos distintos de isomería, la denominada **isomería estructural** (o plana), en la que los compuestos isómeros se diferencian en la disposición espacial de los átomos cuando dibujamos los compuestos en 2D, y la **estereoisomería** (o espacial), en la que los compuestos isómeros son distintos cuando se comparan sus estructuras reales en 3D.



La **isomería estructural** puede ser de 3 tipos:

- a) **Isomería de cadena.** La cadena que forma el esqueleto de los compuestos es distinta:



- b) **Isomería de posición.** El grupo funcional es el mismo para ambos compuestos, pero ocupa posiciones diferentes en la cadena:

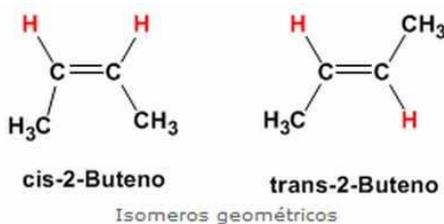


- c) **Isomería de función.** Los isómeros tienen grupos funcionales diferentes (aldehído-cetona/alcohol-eter/carbonilo-enol):



La **estereoisomería** consiste en que los isómeros tienen los mismos sustituyentes, pero su disposición en el espacio es diferente para cada uno. Existen dos tipos distintos:

- **Isomería CIS-TRANS.** Se da en compuestos con enlaces dobles y que tengan sustituyentes diferentes en los átomos de C.



- **Isomería óptica.** Aparece en compuestos en los que existe un átomo de C con los cuatro sustituyentes distintos entre sí (los carbonos con esa característica se llaman carbonos asimétricos).

