

Formulación orgánica

Compuestos orgánicos: contienen C, en que siempre es tetravalente, forma cuatro enlaces, pueden ser 4 simples, 2 simples y 1 doble, 2 dobles ó 1 simple y uno triple. Además de C, tienen otros elementos, fundamentalmente H, O y N.

Formulación:

Hay varias maneras de expresar la fórmula (desarrollada, molecular, Lewis), pero debe reflejar estructura; se suele usar semidesarrollada /condensada, aunque a veces se usan mezclas.

Por sencillez se utiliza a menudo una variante de la semidesarrollada que es la **esqueletal** en la que solo se representan líneas como enlaces, siendo los vértices los C, sin representar C ni H, pero representando las cosas distintas presentes como O ó N. En esqueletal se asume cuantos H faltan a cada C; en la semidesarrollada hay que calcularlos e indicar el número de H.

Es habitual representar fórmula en una única línea, poniendo ramificaciones entre paréntesis y abreviando los grupos con ciertas notaciones.

Ejemplo: varias representaciones de $\text{CH}_3\text{-CH}(\text{CH}_3)\text{-CH}_2\text{-CH}_3$



Nomenclatura orgánica (I)

Nomenclatura: usamos las normas IUPAC de 1993: muchos libros utilizan todavía las normas de 1979 (existen normas de 2013 con PIN)

Hay varios tipos pero nos centramos en un único tipo de nomenclatura, “de sustitución”; la idea es asumir una cadena inicial formada solamente por C e H con enlaces simples e ir indicando dónde se sustituyen H por otras cosas (ramificaciones, grupos funcionales)

Idea básica de nomenclatura: el nombre está formado por tres cosas:

1. Nombre raíz: indica nº de C de la cadena principal

1 Met-, 2 Et-, 3 Prop-, 4 But-, 5 Pent-, 6 Hex-, 7 Hept-, 8 Oct-, 9 Non-, 10 Dec-, 11 Undec- ...

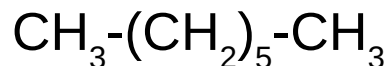
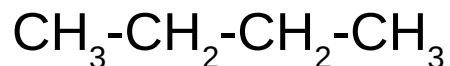
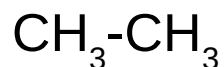
2. Prefijos y sufijos: indican el grupo o grupos funcionales presentes. Si hay varios van precedidos de un prefijo multiplicador (di-,tri-,tetra-...)

Existe un sufijo -ano que realmente no está asociado a ningún grupo funcional, sino a la ausencia de todos ellos (solamente enlaces simples)

3. Localizadores: si hay ambigüedad al situar un grupo funcional, los prefijos y/ o sufijos van precedidos de un número que indica la posición.

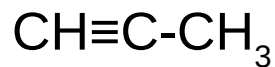
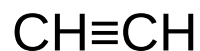
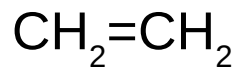


Nomenclatura orgánica (II)



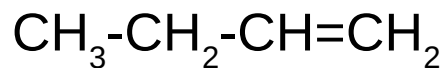
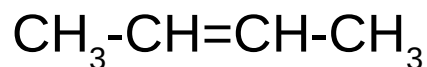
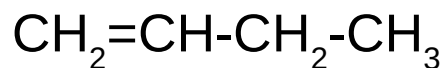
Versiones esqueletales

Primeros sufijos: -eno (doble enlace), -ino (triple enlace)

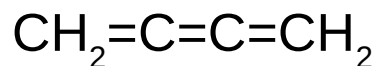
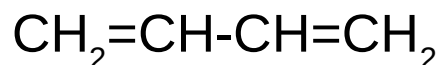
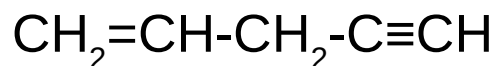
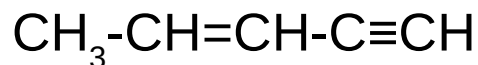


Localizadores

Necesidad de localizadores. Numerar para asignar el número más bajo



Si hay dobles y triples al tiempo, son “eninos”, se nombra primero doble y luego triple. Ante igualdad entre dobles y triples tienen prioridad los dobles.



Radicales y ramificaciones

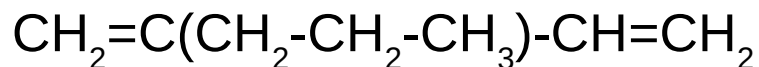
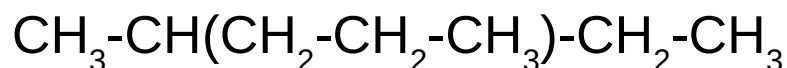
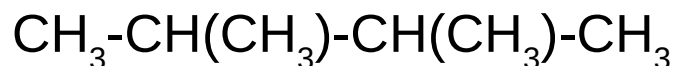
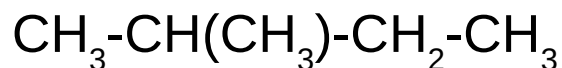
Los radicales (“pérdida de 1 H”) se nombran terminados en -ilo (si solamente es -ano, se omite: metilo, no metanilo), pero al utilizarse como grupo funcional en ramificaciones se nombran terminados en -il



Para decidir qué son radicales, hay que pensar qué cadena es la principal

La regla se detalla después, pero una idea inicial es la cadena con “mayor número de sustituyentes y más larga”

Al nombrar los radicales se ponen antes de la raíz, con localizador si hace falta



Ramificaciones de ramificaciones

Se busca la “rama principal” con los mismos criterios que la cadena principal, con una condición importante: el carbono que ha perdido el hidrógeno, que es el carbono por el que se une a la cadena principal, siempre es el 1, es el más prioritario y debe estar contenido y en un extremo de la rama.

La rama principal tiene su propia raíz, su propio localizador en la cadena principal, y sus propios localizadores (a veces se usa 1', 2', 3' ...) por diferenciar.

Ejemplo: 3-(2'-metilpropil)pent-1,4-dieno

Los localizadores en ramas se introducen con ramas de ramas, pero aplican a otras cosas como dobles enlaces.



Ciclos

Se llaman ciclos a cadenas cerradas.

Se usa prefijo ciclo- antes de la raíz. Se suele usar notación esquelética en el ciclo, que se puede combinar con notación semidesarrollada en los sustituyentes.

Numeración empieza en sustituyente principal, asignando el número más bajo posible.

Ejemplos:

- Ciclopropano
- Ciclobutano
- Ciclopenteno
- 1-etil-2-metilciclohexano

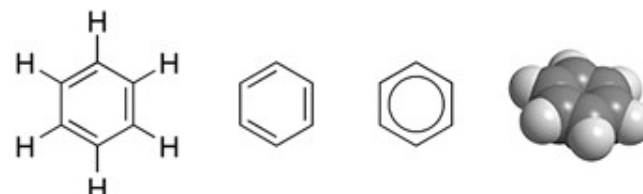
Un caso concreto de ciclo lleva a los compuestos aromáticos



Aromáticos

Son compuestos con ciclos y enlaces múltiples: los derivados del benceno (C_6H_6) lo son, y otros que no se ven en 1º Bachillerato.

El benceno tiene varias maneras de representarse, es habitual con un círculo en el centro.



https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Benzene_structure.png

Nombre sistemático benceno es ciclohex-1,3,5-trieno; como sustituyente tiene nombre aceptado por IUPAC fenil (C_6H_5- , Ph-)

Un benceno sustituido se numera en el sentido que asigne los localizadores más bajos

Es muy habitual usar prefijos orto- (o-), meta- (m-), para- (p-) para posiciones (1,2) (1,3) y (1,4) en caso de haber dos sustituyentes.

Hay nombres comunes aceptados:

- Tolueno $Ph-CH_3$
- Ácido benzoico $Ph-COOH$
- Fenol $Ph-OH$



Grupos funcionales (I)

Se indican por orden de prioridad (tomado tabla 10 IUPAC, no están todos)

R y R' indican ramificaciones generales.

¿Sufijo o prefijo? lo más prioritario sufijo, resto como prefijo

En Bachillerato sí se tratan polifuncionales, que usan prefijo (obligatorio en 2º)

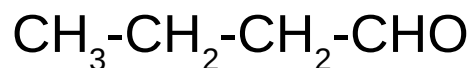
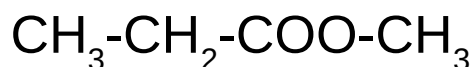
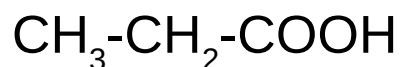
Pr.	Función	Fórmula	Sufijo	Prefijo
5	Ácido	R-COOH	Ácido "R+1"-oico	Carboxi-
7	Éster	R-COO-R'	"R+1"-oato de R'-ilo	R-oxicarbonil-
9	Amida	R-CONH ₂	R-amida	Carbamoil- Amido- (unido N)
12	Nitrilo	R-C≡N	-nitrilo	ciano-
13	Aldehido	-CHO	-al	Oxo-
14	Cetona	-CO-	-ona	Oxo-
15	Alcohol	-OH	-ol	Hidroxil-
17	Amina	R-NH ₂	R-amina (ojo polisustituidas R-R'-R''-amina)	Amino-
20	Éteres	R-O-R'	R-il-R'il-éter	R-oxi-



Grupos funcionales (I). Ejemplos

En 1º Bachillerato es obligatorio “funciones oxigenadas y nitrogenadas”: vemos lo indicado como obligatorio en 4º ESO “alcoholes, aldehídos, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres y aminas.” (subrayados en la tabla). [Además en 1º Bachillerato éteres por su relación con isomería con alcoholes.](#)

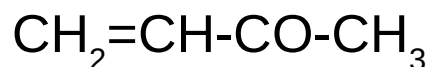
Ejemplos sencillos, un único grupo por lo que siempre sufijo, más posibles dobles y triples



Comentario notación: -COOH vs HCOO-



ácido vs éster (metanoato)



en función posición del H (en O ó en C)



Grupos funcionales (II)

Además de estos grupos funcionales, se pueden considerar como tales, y de menor prioridad que los de la tabla 10 (con prioridad “decreciente por lotes”) otros, algunos ya vistos:

-f. Insaturaciones: Dobles enlaces (sufijo -eno, prefijo sería una rama, alquenil), triples enlaces (sufijo -ino, prefijo sería una rama, alquinil)

-g. Grupos siempre nombrados como prefijos:

- Halogenuros R-X (prefijo nombre halógeno X terminado en o (fluoro, cloro, bromo, yodo (no usar iodo aunque lo admite la RAE))
- Nitro (-NO₂) prefijo “nitro-”
- Nitroso (-NO) prefijo “nitroso-”
- Ramificaciones (antes de raíz tras nombrarlos como radicales)



Nombrar en orgánica (I)

El proceso de nombrar tiene 3 pasos (en ejemplos iniciales se usan indirectamente pero de manera simplificada)

1º Elegir la cadena principal: esencial para nombrar un compuesto, ya que de su elección depende el nombre raíz y qué grupos habrá que nombrar como sufijos y cuales como prefijos.

2º Numerar la cadena principal: se numeran los carbonos empezando por el 1 para situar en ellos los sustituyentes.

3º Nombrar la cadena principal y los sustituyentes: grupo funcional principal sufijo (si lo tiene), resto como prefijos

Es importante ver que un mismo compuesto orgánico se puede representar de varias maneras pero tiene el mismo nombre.

Idea: pensar en pintarlo en una ventana y luego mirarlo desde el otro lado de la ventana girando el cristal: es el mismo compuesto, tendrá la misma cadena principal, los mismos números a asignar, y el mismo nombre.



Nombrar en orgánica (II)

1º Elegir la cadena principal

Criterios (simplificados por orden de prioridad, el último enlaza con la numeración):

1. Debe contener el máximo número de sustituyentes y grupo funcional más prioritario, y el mayor nº posible de grupos funcionales más prioritarios.
2. Debe tener el mayor número de dobles y triples enlaces, considerados juntos. Ante igualdad tienen prioridad el mayor nº de dobles.
3. Debe ser la cadena de longitud máxima
4. Debe asignar los localizadores más bajos a los grupos funcionales más prioritarios. Ante igualdad, se usa orden alfabético.



Nombrar en orgánica (III)

2º Numerar la cadena principal

Criterios:

1. El grupo principal siempre tiene que tener el localizador más bajo posible

En radicales el carbono que ha perdido el hidrógeno siempre es el 1; es el carbono por el que se une a la cadena principal.

2. Los demás grupos funcionales deben tener los localizadores más bajos posibles, por lotes de prioridad (primero “lote grupos tabla 10”, luego lote “f” con dobles y triples, y luego “lote g” con nombrados como prefijos).

3. Los localizadores a dobles y triples enlaces se asignan lo más bajos posibles sin distinguir entre ellos. Ante igualdad tienen prioridad los dobles.

Ejemplos: $C(CH_3)_3-CH_2-CH=CH_2$ asigna 1 a doble (lote f), no a metilos (lote g)

$CH_2=CH-CH_2-C\equiv CH$ es pent-1-en-4-ino (hay igualdad entre doble y triple)



Nombrar en orgánica (IV)

3º Nombrar la cadena principal y los sustituyentes

- Se utiliza el nombre raíz de la cadena principal
- El grupo principal se nombra como sufijo, y los demás grupos funcionales como prefijos. Las ramas se nombran como prefijos y radicales.
- Prefijos por orden alfabético sin tener en cuenta un posible “prefijo multiplicador”.
- Al poner sufijos, se nombran primero dobles enlaces y luego los triples.
- Si hay ambigüedad, se indica con un número el localizador de cada prefijo/sufijo, **inmediatamente** antes (IUPAC 1993 “Hex-2-eno (anteriormente 2-Hexeno)”) del mismo. Ejemplo no ambiguo; grupo que solo puede ir en carbono terminal de la cadena, se asume 1 y se omite localizador.
- Si hay varios localizadores para un mismo sustituyente, se indican separados por comas.
- Entre localizadores y prefijos/sufijos se insertan guiones.



Otras ideas de orgánica avanzada

Isomería (se trata por separado)

- Prefijos asociados: cis-/trans-, Z-/E-.
- A veces se usa representación bidimensional (dibujo en papel) que permite dar indicaciones de perspectiva tridimensional.

Temas que no se tratan en 1º Bachillerato.

- Compuestos aromáticos formados por varios anillos unidos, tienen reglas propias de numeración.
- Nombres tradicionales de compuestos orgánicos aceptados por IUPAC
Hay muchos, algunos ejemplos:

<i>Fórmula</i>	<i>Nombre común</i>	<i>Nombre sistemático</i>
$\text{CH}_2=\text{CH}_2$	Etileno	Eteno
$\text{CH}\equiv\text{CH}$	Acetileno	Etino
$\text{CH}_3\text{-COOH}$	Ácido acético	Ácido etanoico
$\text{CH}_2=\text{CH-CH}_3$	Propileno	Propeno
$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$	Acetona	Propanona



Traca final de orgánica

Cowenynenynol



Serpentenynenynol



Giraffenynenynol



acetylseryltyrosylserylsoleucylthreonylserylprolylserylglutaminyphenylalanylvalylphenylalanylleucylserylserylvalyltryptophylalanylasparylprolylsoleucylglutamylleucylleucylasparaginyvalylcysteinylthreonylserylserylleucylglycylasparaginyglutaminyphenylalanylglutaminythreonylglutaminyglutaminyalanylarginylthreonylthreonylglutaminyvalylglutaminyglutaminyphenylalanylserylglutaminyvalyltryptophyllsylprolylphenylalanylprolylglutaminyserylthreonylvalylarginylphenylalanylprolylglycylaspartylvalyltyrosyllsylvallyltyrosylarginyltyrosylasparaginyalanylvalylleucylaspartylprolylleucylsoleucylthreonylalanylleucylleucylglycylthreonylphenylalanylasparylthreonylarginylasparaginylarginylsoleucylsoleucylglutamylvalylglutamylasparaginyglutaminyglutaminyserylprolylthreonylthreonylalanylglutamylthreonylleucylaspartylalanylthreonylarginylarginylvalylaspartylaspartylalanylthreonylvalylalanylsoleucylarginylserylalanylasparginylsoleucylasparaginylleucylvalylasparaginyglutamylleucylvalylarginylglycylthreonyllycylleucyltyrosylasparaginyglutaminyasparaginythreonylphenylalanylglutamylserylmethionylserylglycylleucylvalyltryptophylthreonylserylalanylprolylalanylserine

J. Chem. Ed. 74 (1997) 782

La cuchara menguante, Sam Kean.
Nombre virus del mosaico dell tabajo (1185 letras)

