

FORMULACIÓ I NOMENCLATURA ORGÀNICA

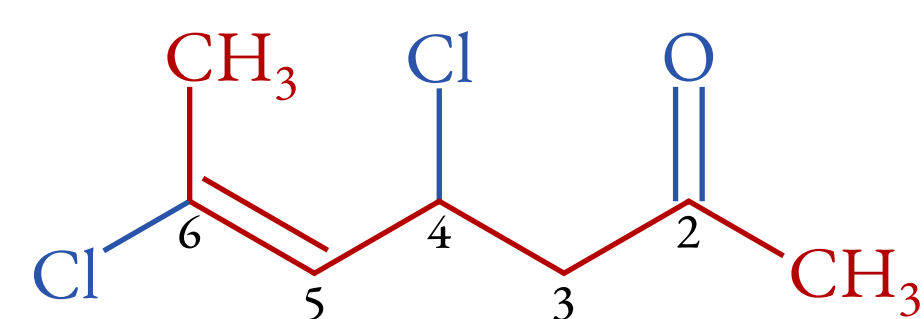
Recomanacions i noms preferits de la IUPAC de 2013

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (@ocolomar)



Nomenclatura de substitució

És la **nomenclatura principal** per anomenar **compostos orgànics**, els quals es tracten com una **combinació d'un compost pare** i de **grups funcionals**, un dels quals es designa com el **grup funcional principal**. El grup principal formarà la **cadena principal**, mentre que la resta podrà formar parte de la cadena principal o formar **cadena laterals**.



4,6-diclorohept-5-en-2-ona

hept(a)	cadena principal (heptà)	ona	sufix pel grup principal (cetona)
en(o)	insaturació	cloro	prefix de substituents
di	prefix multiplicador	2 4 5 6	localitzadors

Prefixos multiplicadors per entitats simples i complexes

Nº	SIMPLE	COMPLEX	Nº	SIMPLE	COMPLEX
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

Creació de noms sistemàtics

La **formació d'un nom sistemàtic** requereix diversos passos:

1. **Determinar el grup funcional principal** que s'anomenarà mitjançant un **sufix**.
2. **Determinar la cadena principal**, que ha de **contenir el grup principal**.
3. **Anomenar la cadena principal i especificar** qualsevol **insaturació** (enllaços C=C y C≡C).
4. **Combinar el nom de la cadena principal amb el sufix del grup funcional principal**.
5. **Identificar els substituents i ordenar** els seus **prefixos alfabèticament**.
6. **Insertar prefixos multiplicadors i localitzadors**.

Elecció i numeració de la cadena principal

Elecció

La **cadena principal** es **tria** aplicant els següents **critèris**:

1. Conté el grup funcional principal.
2. Conté el major nombre de grups funcionals.
3. Els sistemes d'anells són prioritats enfront de les cadenes.
4. Conté més àtoms.
5. Conté més enllaços múltiples (dobles en cas d'empat).
6. Conté més substituents.

Numeració

La **cadena principal** es **numera** aplicant els següents **critèris**:

1. Localitzadors més baixos per a heteroàtoms (substituents d'algun C en la cadena principal).
2. Localitzador més baix pel grup funcional principal.
3. Localitzadors més baixos per a enllaços dobles i triples.
4. Localitzadors més baixos com conjunt per a tots els substituents anomenats com a prefixos.
5. Localitzadors més baixos per substituents en ordre de menció (alfabètic).

Grups funcionals – sufixos i prefixos

Un **grup funcional** és un **àtom o grup d'àtoms** dins d'una molècula que pot ser **responsable** de les **reaccions químiques característiques** d'aquesta **molècula**. La següent taula mostra la fórmula, sufix (si és principal) i prefix de cadascun d'ells, en ordre decreixent de **prioritat**:

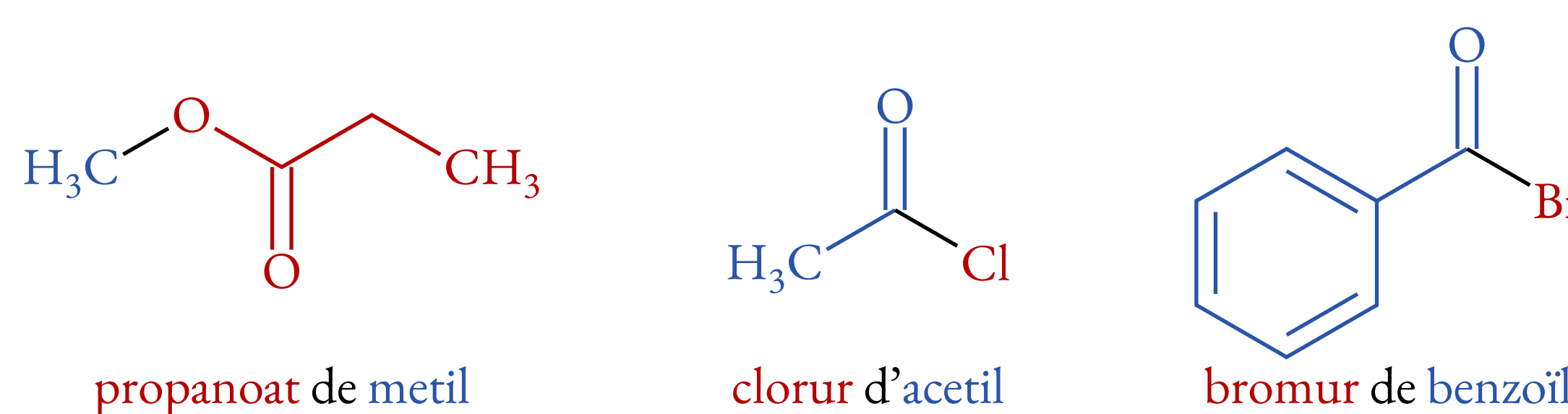
GRUP FUNCIONAL	FÓRMULA*	SUFIX (PRINCIPAL)	PREFIX (SUBSTITUENT)
Carboxilats	-COO ⁻ -(C)OO ⁻	-carboxilat -oat	carboxilat-
Àcids carboxílics	-COOH -(C)OOH	àcid ...carboxílic àcid ...oic	carboxi-
Èsters	-COOR -(C)OOR	...carboxilat (de R) ...oat (de R)	(R)oxicarbonil-
Halurs d'àcid	-COX -(C)OX	halur de ...carbonil halur de ...oilo	fluorocarbonil- clorocarbonil- bromocarbonil- iodocarbonil-
Amides	-CONH ₂ -(C)ONH ₂	-carboxamida -amida	carbamoil-
Nitrils	-C≡N -(C)≡N	-carbonitril -nitril	ciano-
Aldehids	-CHO -(C)HO	-carbaldehid -al	formil- oxo-
Cetones	=O	-ona	oxo-
Alcohols	-OH	-ol	hidroxil-
Tiols	-SH	-tiol	sulfanil-
Amines	-NH ₂	-amina	amino-
Èters**	-OR		(R)oxi-
Haloalcans**	-F -Cl -Br -I		fluoro- cloro- bromo- yodo-
Nitrocompostos**	-NO ₂		nitro-

* Aquí -(C) indica que l'àtom de carboni està implícit a la cadena principal.

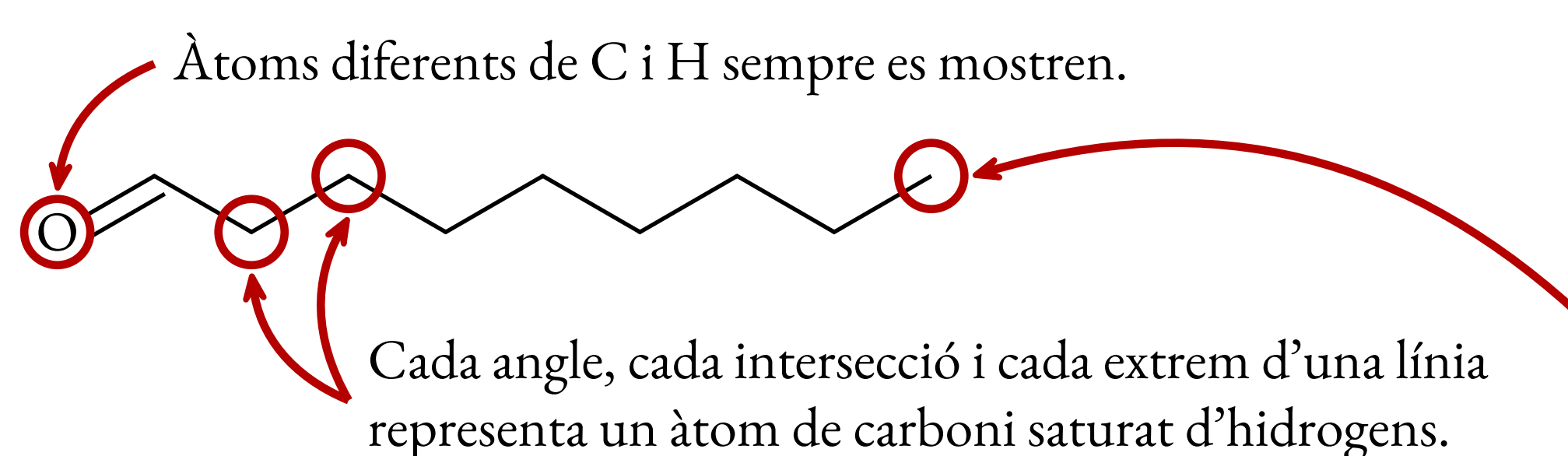
** Els èters, haloalcans i nitrocompostos es representen per prefixos en ordre alfabètic.

Nomenclatura de classe funcional

També coneguda com nomenclatura **radicofuncional**, és la **preferida** pels **èsters i halurs d'àcid** (també emprada per **èters i cetones**). Aquesta consisteix en el **nom del grup principal** del compost seguit de la paraula **de** i el **nom del substituent** al que va unit.



Representació gràfica (ziga-zaga)



Compostos pare (hidrocarburs)

Compostos orgànics formats únicament per àtoms de **C i H**. Distingim entre:

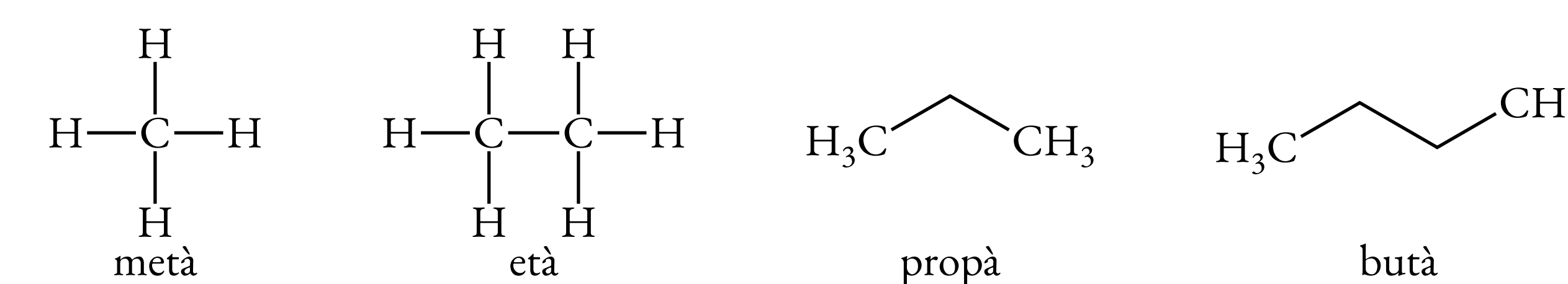
Alifàtics Poden ser de **cadena oberta** (acíclics) o **tancada** (cíclics).

Aromàtics Hidrocarburs **cíclics** amb enllaços simples i múltiples alternats. Ej.: **benzè**.

Alcans (C-C)

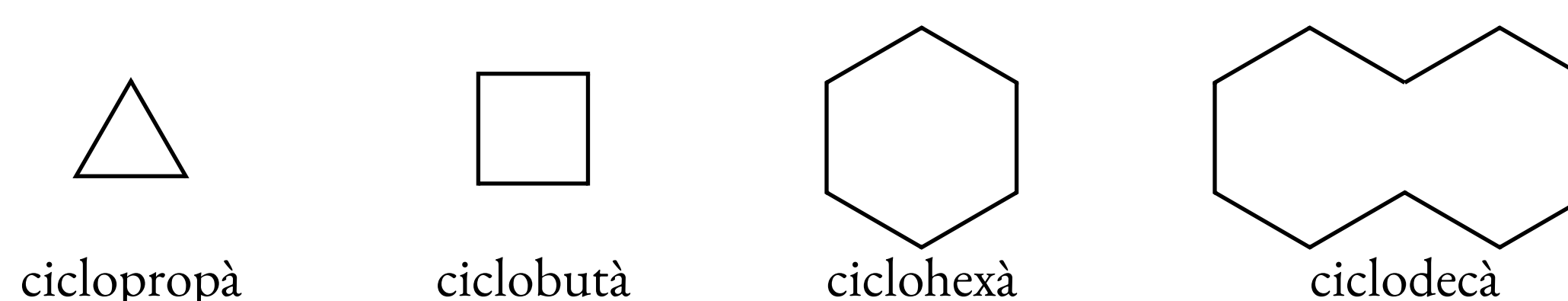
Hidrocarburs en els quals els **enllaços C-C** són tots **simples**. S'anomenen amb un **prefix** que indica el nombre d'àtoms de C i la **terminació -à**.

NOMBRE D'ÀTOMS DE C	1	2	3	4	5	6	7	8	...
PREFIX	met-	et-	prop-	but-	pent(a)-	hex(a)-	hept(a)-	oct(a)-	...



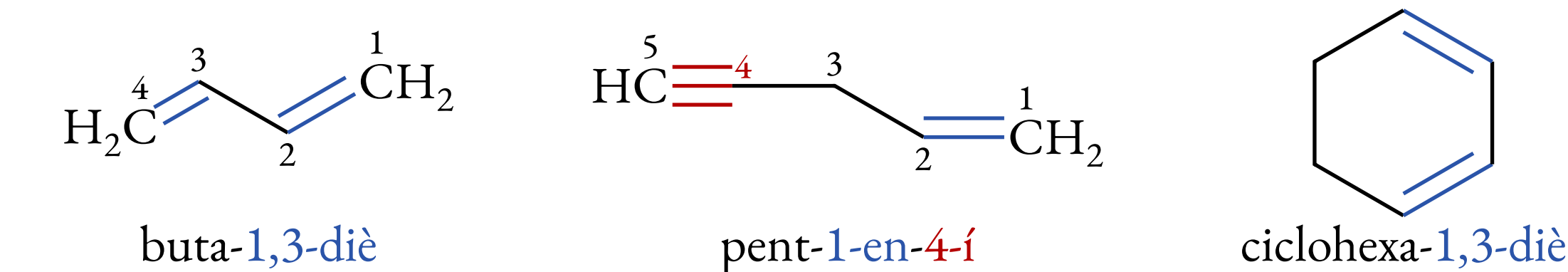
En cas de ser **substituents**, canvien la **terminació -à** per **-il**.

Cicloalcans S'afegeix el **prefixciclo-** al nom de l'hidrocarbur.



Alquens (C=C) i alquins (C≡C)

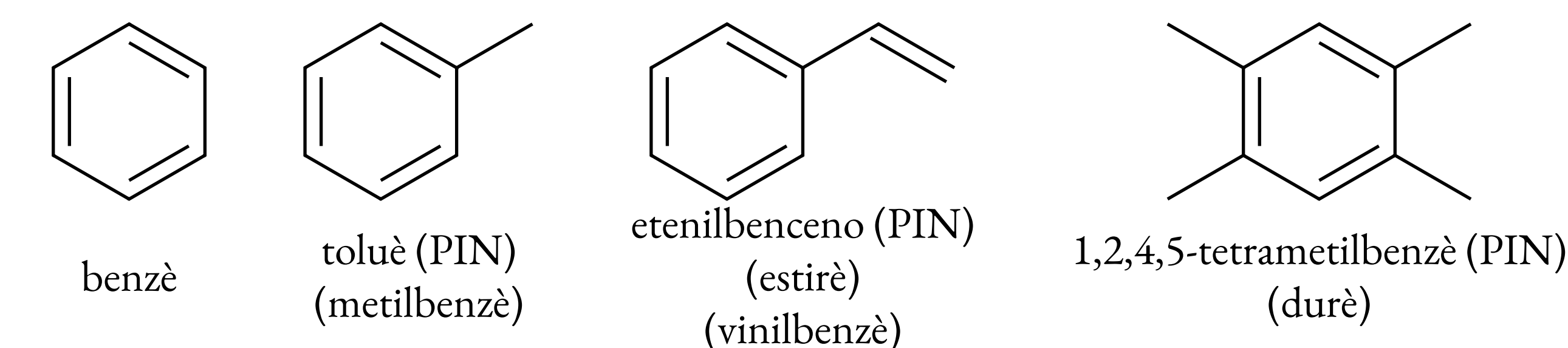
La presència d'**insaturacions —enllaços dobles (C=C) i triples (C≡C)—** s'indica mitjançant les **terminacions -è** e **-í**, respectivament, i **localitzadors** definint les seves posicions.



En cas de ser **substituents**, acaben en **-enil** i **-inil**, respectivament, si s'uneixen mitjançant un enllaç senzill, o en **-ilidè** i **-ilidí** si s'uneixen per un doble o un triple enllaç, respectivament.

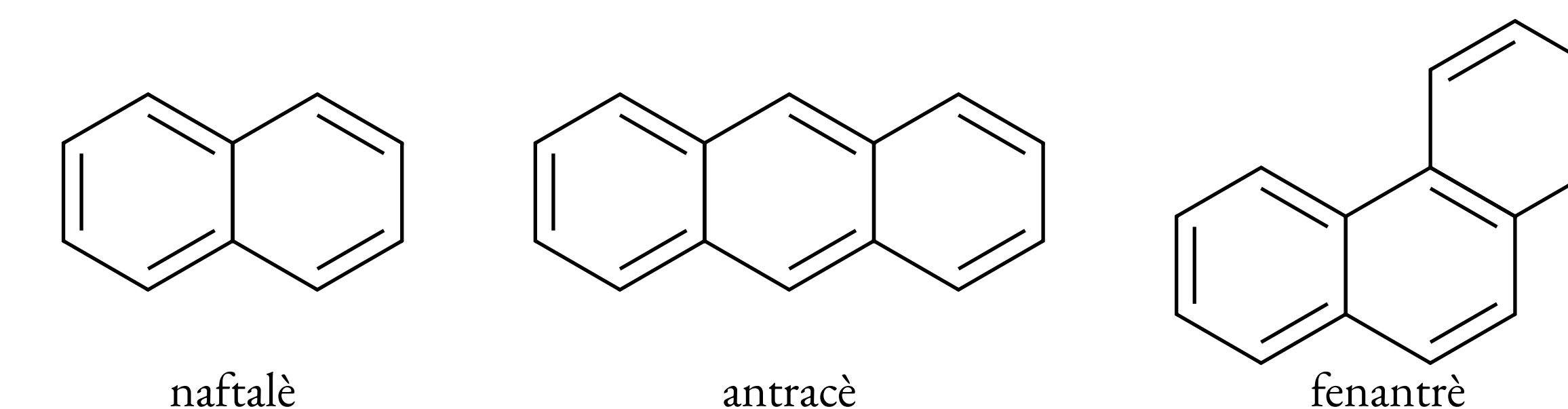
Aromàtics (arens)

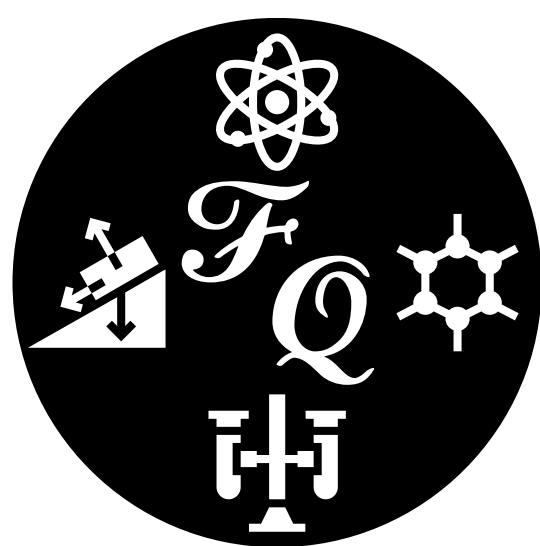
El **benzè**, **C₆H₆**, és l'hidrocarbur aromàtic de **referència**.



En cas de ser **substituent**, es denomina **fenil**.

Arens policíclics amb importància en l'estudi de sistemes biològics





FORMULACIÓ I NOMENCLATURA ORGÀNICA

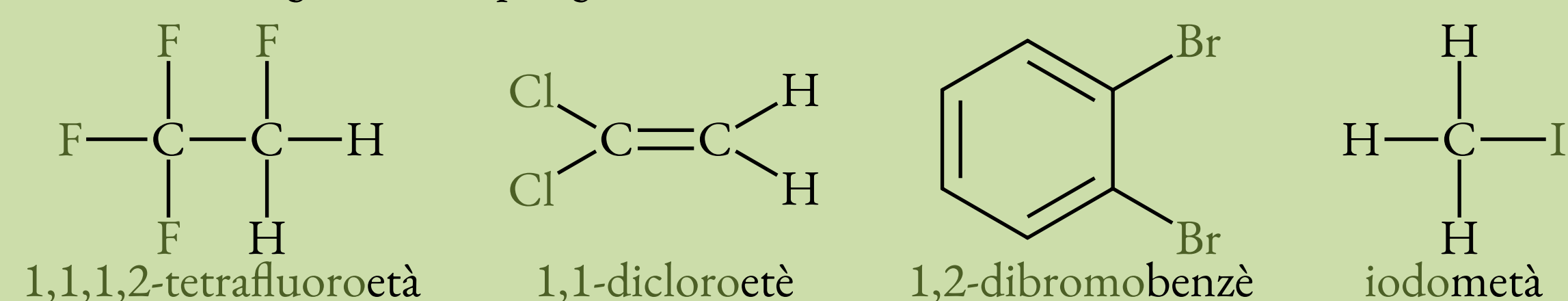
Recomanacions i noms preferits de la IUPAC de 2013

Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (@ocolomar)



Funcions que contenen halògens (F, Cl, Br o I)

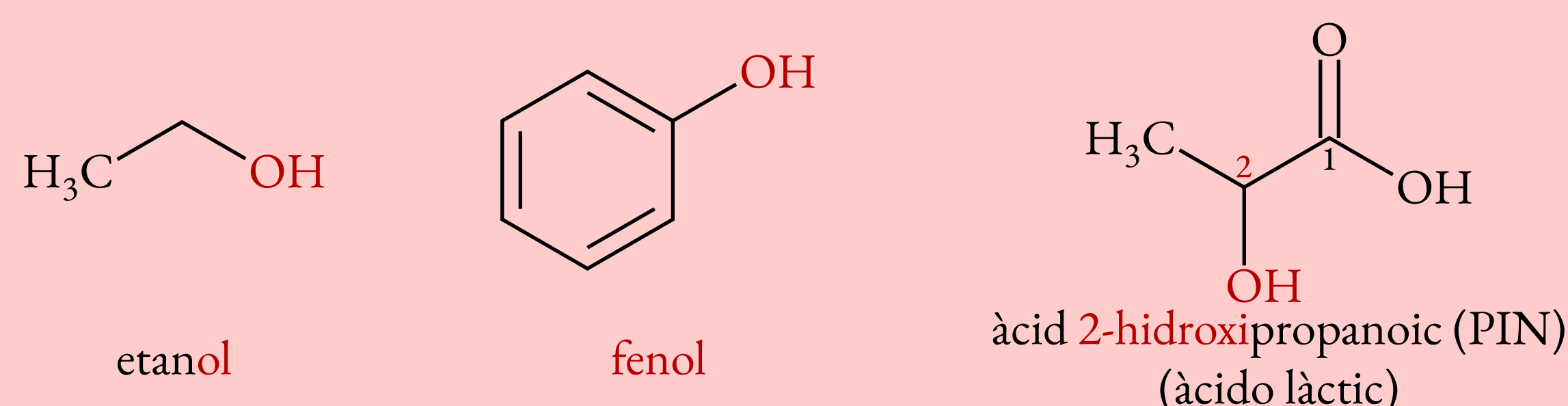
No poden ser mai el grup principal, per tant s'anomenen afegint el **prefix fluoro-**, **cloro-**, **bromo-** o **iodo-**, segons correspongui, al nom de l'hidrocarbur.



Funcions que contenen oxigen (O)

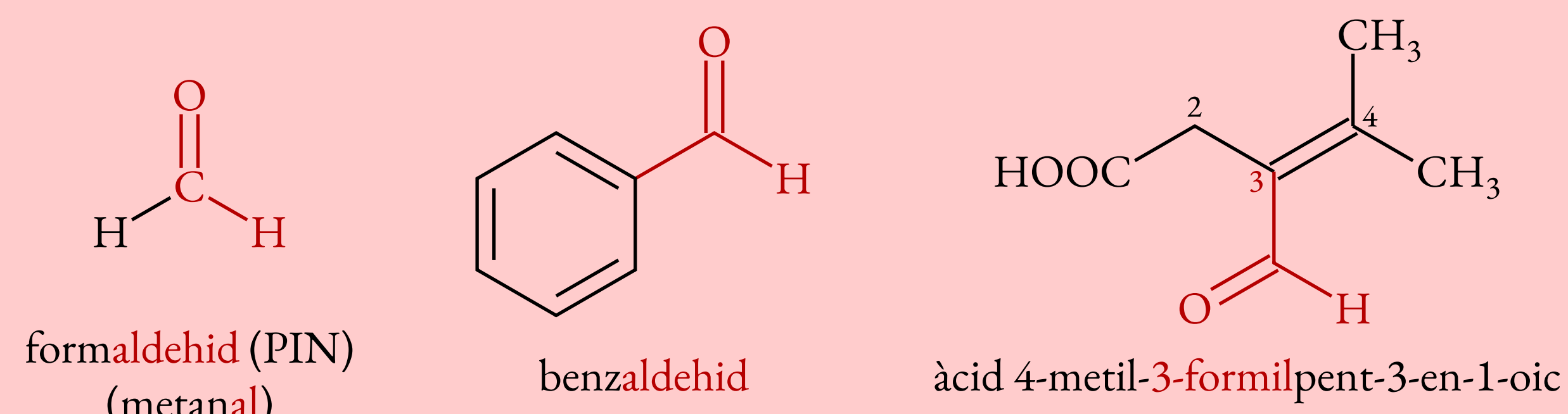
Alcohols (-OH)

Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -ol** al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'empra el **prefix hidroxi-**.



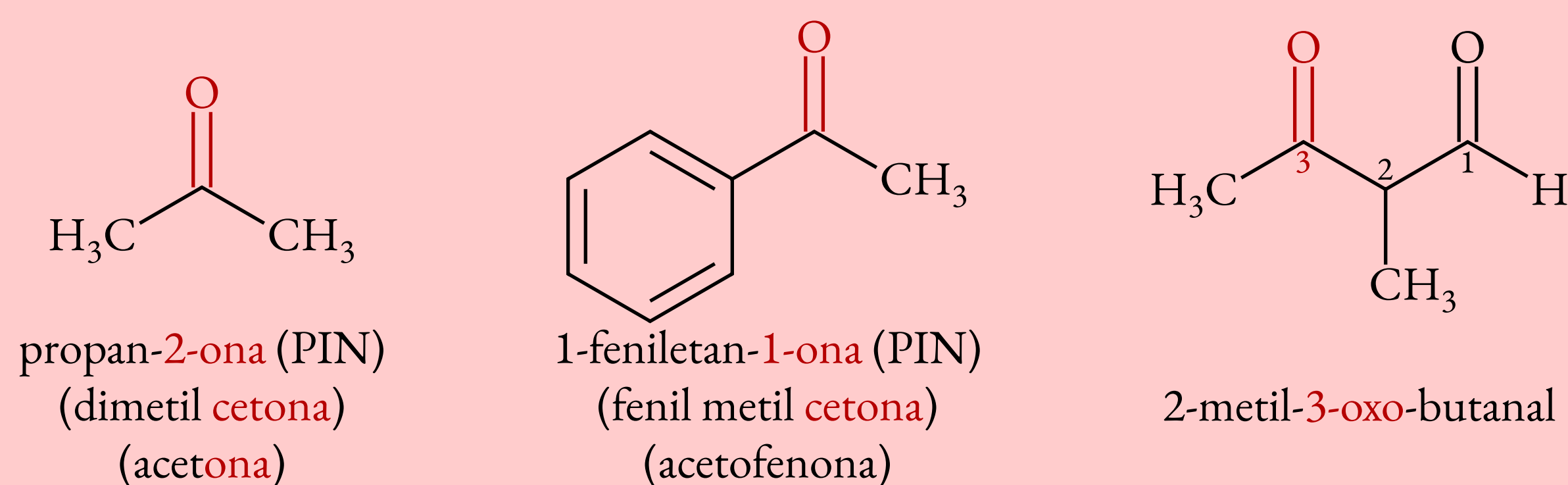
Aldehids (-CHO)

Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -al** (o **-carbaldehid**) al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'empra el **prefix formil-** (o **oxo-**).



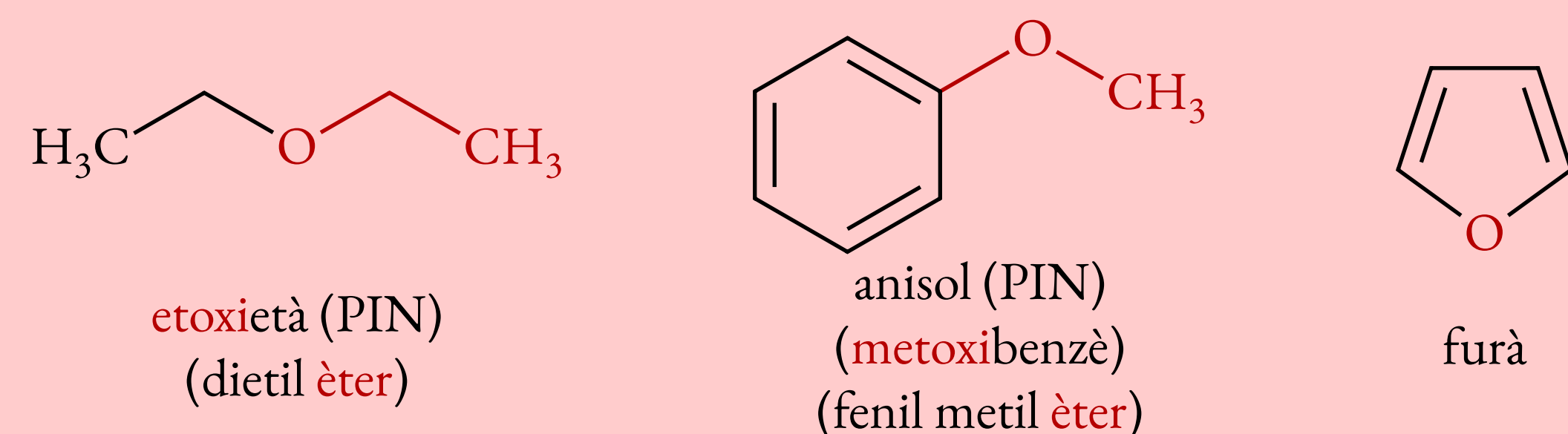
Cetones (=O)

Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -ona** al nom del hidrocarbur, en cas contrari s'empra el **prefix oxo-**.



Èters (-OR)

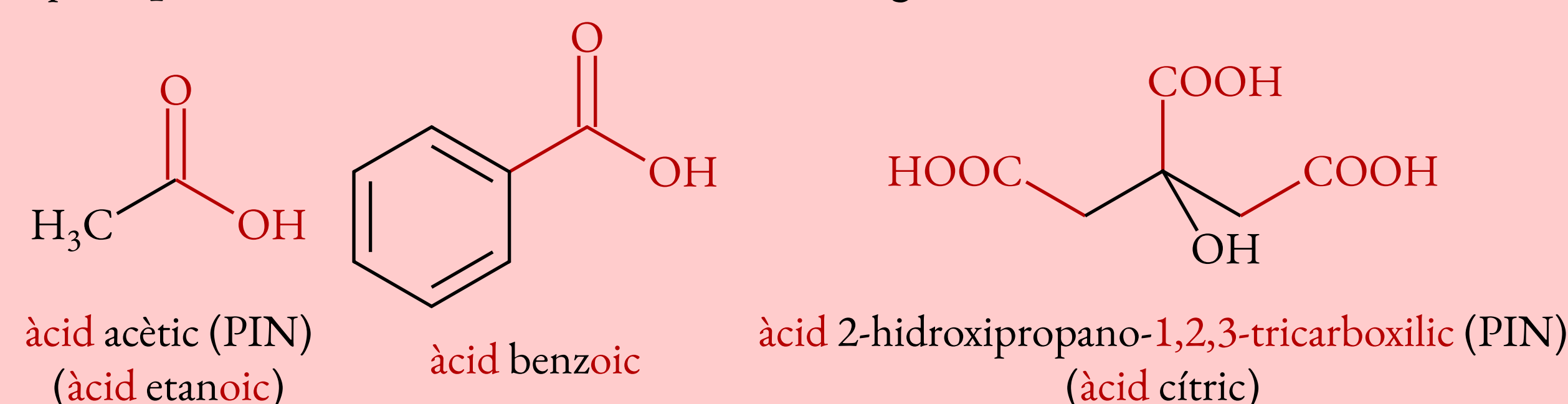
No poden ser mai el grup principal, pel que s'anomenen afegint el **prefix (R)oxi-** al nom de l'hidrocarbur.



Funcions que contenen oxigen (cont.)

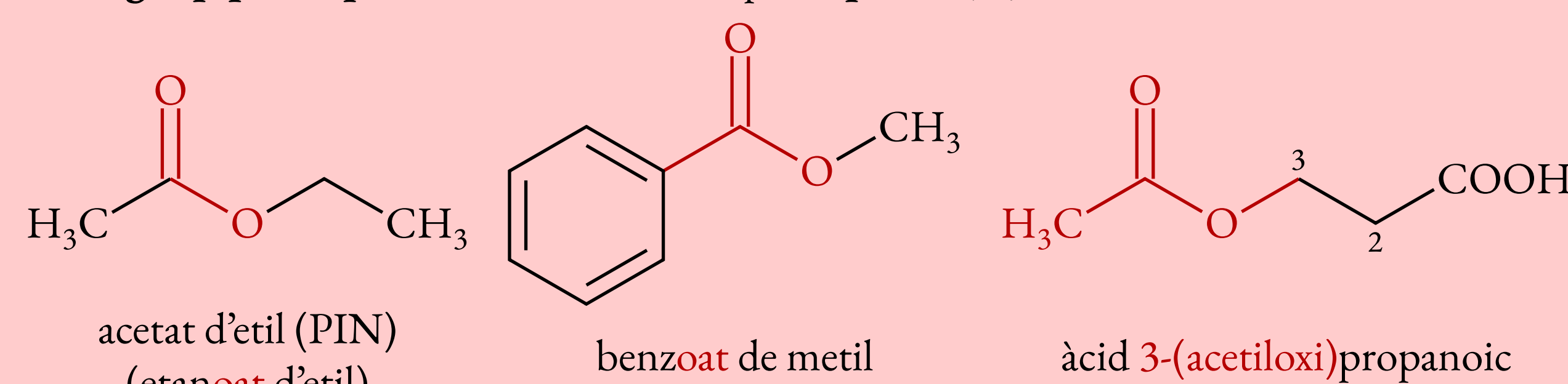
Àcids carboxílics (-COOH)

Són compostos amb un **grup carboxil**, **-C(=O)OH**. Si són el **grup principal** s'anomenen començant per **àcid** i afegint el **sufix -oic** (o **-carboxílic**) al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'empra el **prefix carboxi-**. Ex.: aminoàcids i àcids grassos.



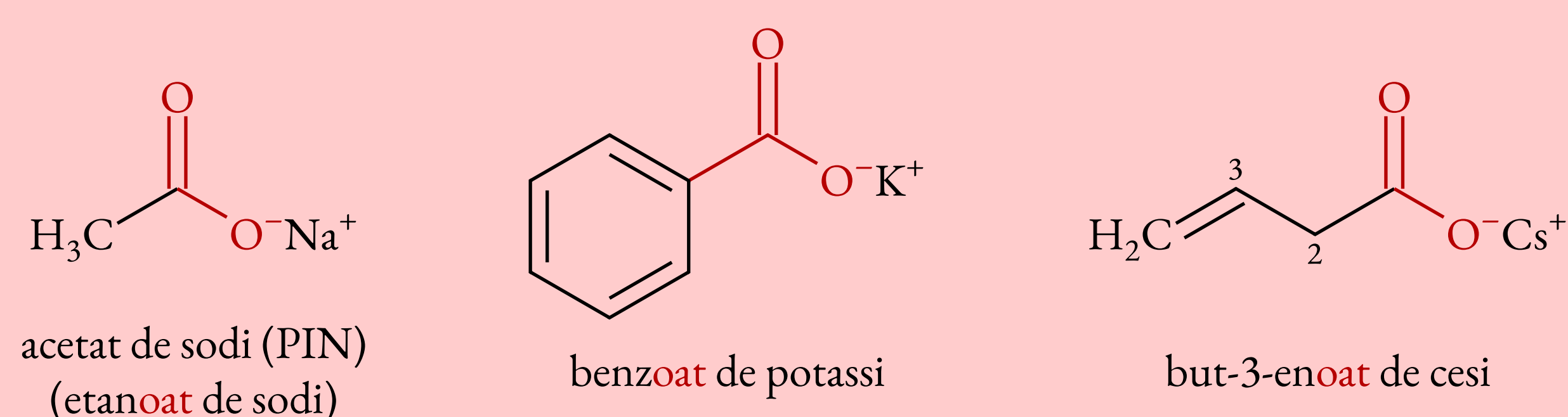
Èsters (-COOR)

Deriven dels àcids, en els quals almenys un grup hidroxi, -OH, es substitueix per un grup -OR. S'empra la **nomenclatura de classe funcional**, substituint la **terminació -oic** de l'àcid per **-oat**, si són el **grup principal**; en cas contrari s'empra el **prefix (R)oxycarbonil-**.



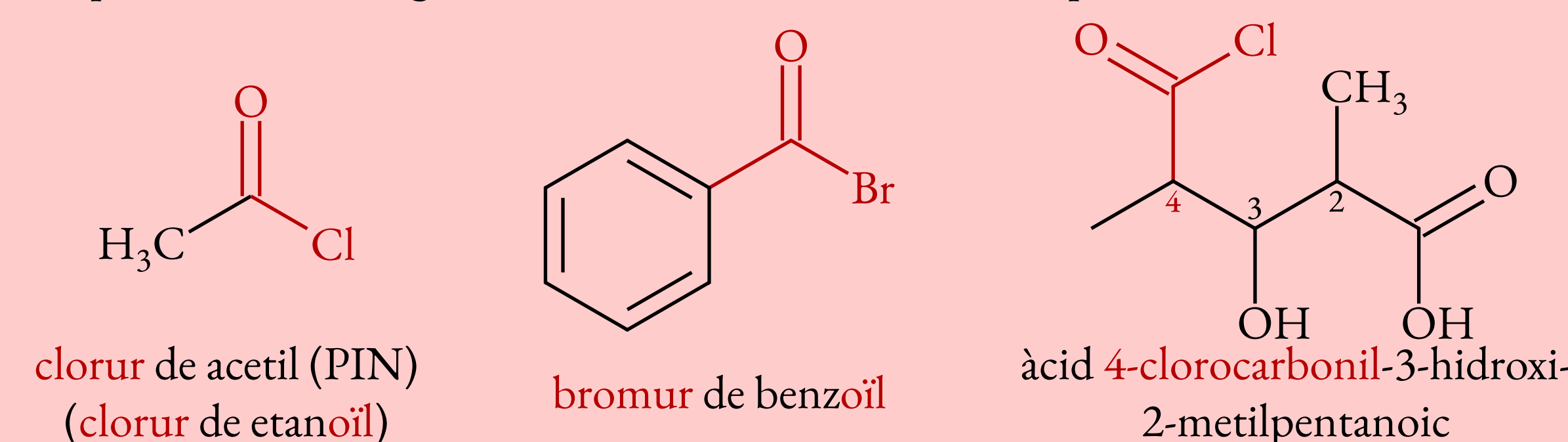
Carboxilats (-COO⁻)

Són la base conjugada d'un àcid carboxílic, sent ions amb càrrega negativa (anions). S'empra la **nomenclatura de classe funcional**, substituint la **terminació -oic** de l'àcid per **-oat**, si són el **grup principal**; en cas contrari s'empra el **prefix carboxilat-**.



Halurs d'àcid (-COX)

Deriven d'àcids carboxílics, substituint el grup hidroxi, -OH, per un halur (F, Cl, Br o I). S'empra la **nomenclatura de classe funcional**, començant per **halur de** i substituint la **terminació -oic** de l'àcid per **-oil**, si són el **grup principal**; en cas contrari s'empra el **prefix halocarbonil-**.



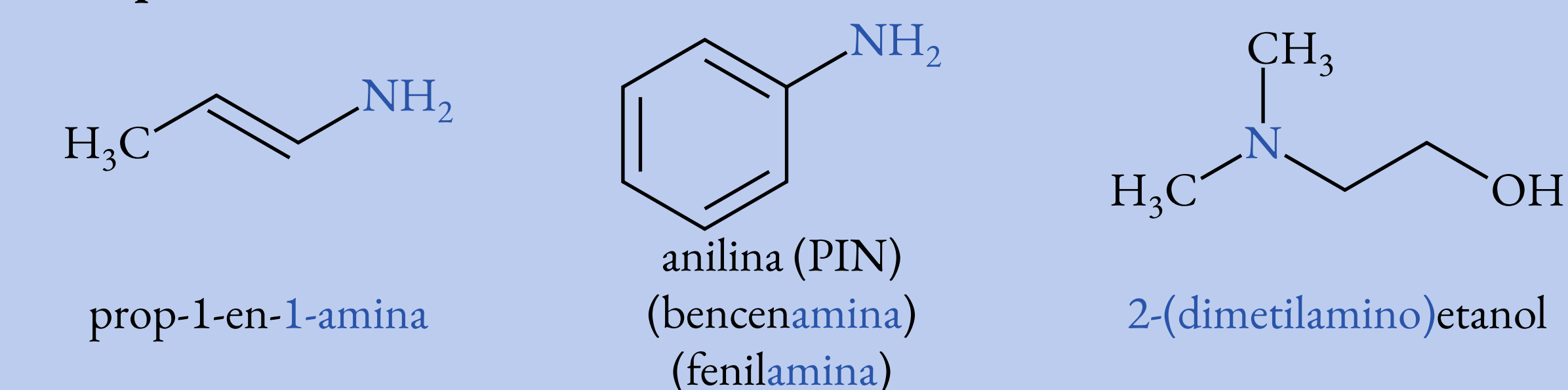
PIN

La nova edició del Llibre Blau incorpora un conjunt jeràrquic de criteris per triar el **nom únic** que es prefereixi a efectes de regulació, el **Preferred IUPAC Name**, o **PIN**.

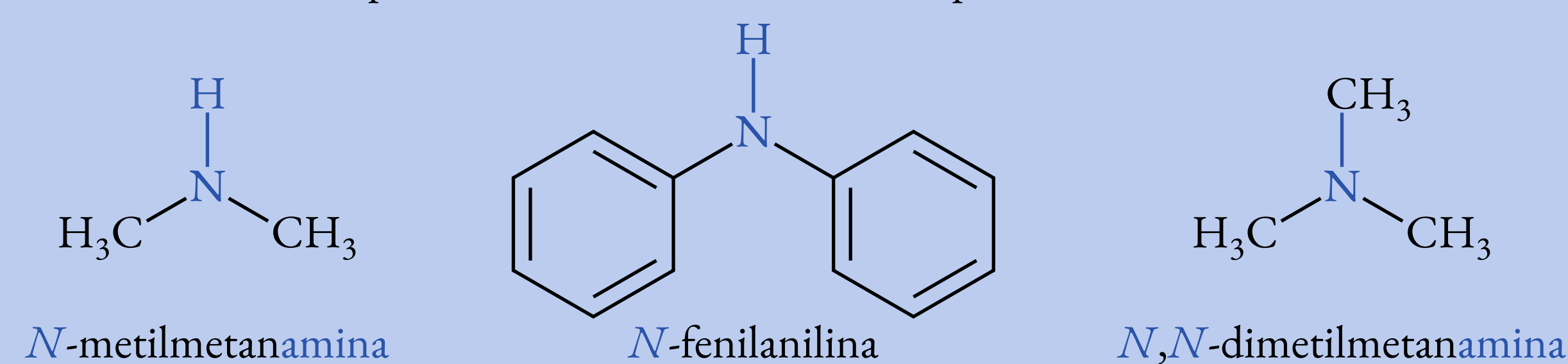
Funcions que contenen nitrogen (N)

Amines (-NH₂)

Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -amina** al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'utilitza el **prefix amino-**.

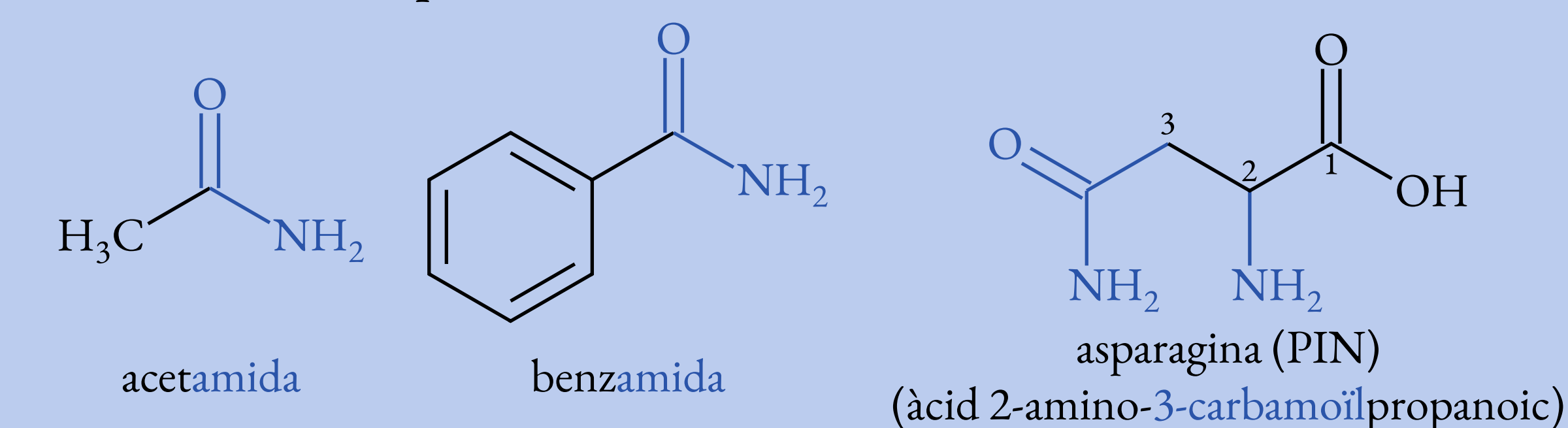


Amines secundàries i terciàries Quan es substitueixen hidrogens del grup **-NH₂** per substituents complexos s'utilitza la lletra **N** en comptes de nombres localitzadors.



Àmides (-CONH₂)

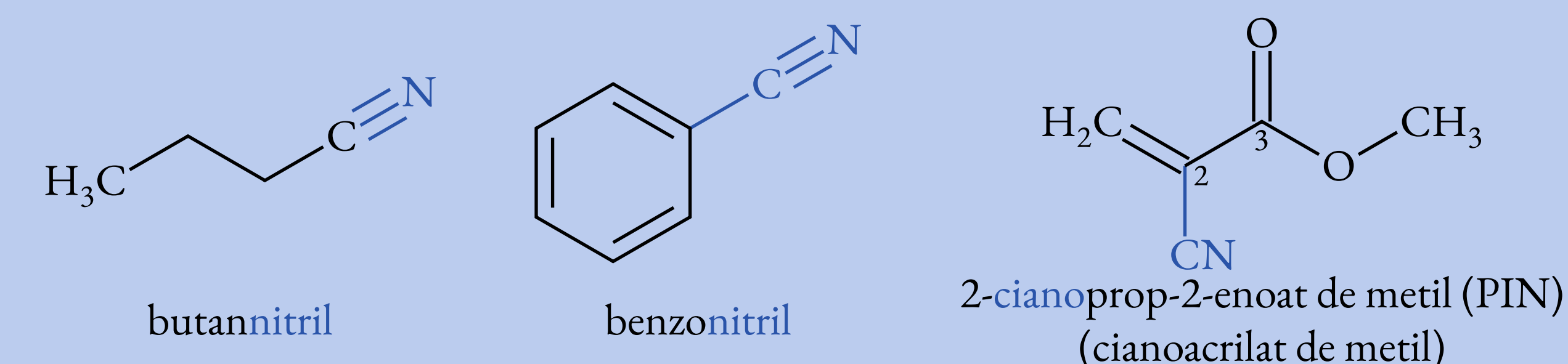
Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -àmida** (o **-carboxàmida**) al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'utilitza el **prefix carbamoil-**.



Àmides secundàries i terciàries Igual que en les amines, la substitució d'hidrogens del grup **-CONH₂** s'utilitza la lletra **N** en comptes de nombres localitzadors.

Nitrils (-C≡N)

Si són el **grup principal** s'afegeix el **sufix -nitril** (o **-carbonitril**) al nom de l'hidrocarbur, en cas contrari s'utilitza el **prefix ciano-**.



Nitrocompostos (-NO₂)

No poden ser mai el grup principal. S'anomenen afegint el **prefix nitro-**.

