

## Nomenclatura y simbología orgánica IV ( continuación) Reglas de la IUPAC I (HIDROCARBUROS)

Entre los años 60 y 70, la IUPAC. cambió de nombre, intitulándose “Comisión en la nomenclatura de Química Orgánica”, con siglas CNOC, publicándose nuevas secciones. La C tendría especial relevancia, ya que abarcaba los compuestos con oxígeno y nitrógeno en las diferentes familias: ácidos y derivados, amidas y nitrilos, aldehidos, cetonas, alcoholes y éteres, aminas, estableciéndose un orden de prelación de funciones, importantísimo a la hora de la elección de la cadena principal. Este orden de prelación que aparece en la tabla 10, de las reglas IUPAC, y del cual se han extraído los compuestos menos frecuentes es el siguiente:

Radicales> Aniones> Cationes>Ácidos>Ánhídridos>Ésteres>Haluros de ácido>Amidas>Imidas>Nitrilos>Aldehidos>Cetonas>Alcoholes y fenoles>Aminas>Iminas>Éteres>Alquenos>Alquinos>Alcanos.

Sin embargo la nomenclatura orgánica cada vez se complicaba mas, haciéndose necesarias nuevas normas de numeración de cadenas, que provocaron en 1971, la introducción de los paréntesis y corchetes para radicales cada vez más complejos. Los radicales expresados en las tablas 1 y 2 de Nomenclatura y simbología orgánica III, aunque están permitidos, también pueden nombrarse sistemáticamente como radicales complejos, disponiéndose entre paréntesis, así:

Tabla 12

Radical (A-2.2.5)	Radical sistemático
Isopropil	(1-metiletil)
Tert-butil	(1,1-dimetiletil)
Sec-butil	(1-metilpropil)
Isopentil	(3-metilbutil)
Tert-pentil	(1,1-dimetilpropil)
Neopentil	(2,2-dimetilpropil)

La guerra química en la nomenclatura orgánica está servida, y los sistemas Beilstein (La biblia orgánica mundial, en alemán , donde se registran todos los compuestos aislados con sus características, creada por Beilstein en 1885) y Chemical Abstract (Sociedad Química Norteamericana) , eran muy dispares<sup>148</sup>. Los problemas son múltiples, y la IUPAC no tiene más remedio que en 1979, poner de acuerdo a ambas corrientes, y crear una nueva reunificación de las reglas de la nomenclatura en química orgánica que publica en el llamado libro azul (por sus capas). En este libro se establecen las reglas que se deberán seguir para unificar las nomenclatura de los compuestos orgánicos. Pero hay un hecho fundamental aparte de fijar entre paréntesis los radicales complejos, y es que el localizador siempre estará delante de lo que debe localizar, separándose con guiones. Las ramificaciones iguales deberán reunirse, con localizadores seguidos que se separarán por comas. La última ramificación salvo que sea compleja deberá unirse nominalmente a la cadena principal.

<sup>148</sup> El sistema Beilstein, alemán era muy diferente del norteamericano Chemical Abstract.

En los hidrocarburos (serie A), se establecen normas de numeración y elección de cadena principal.

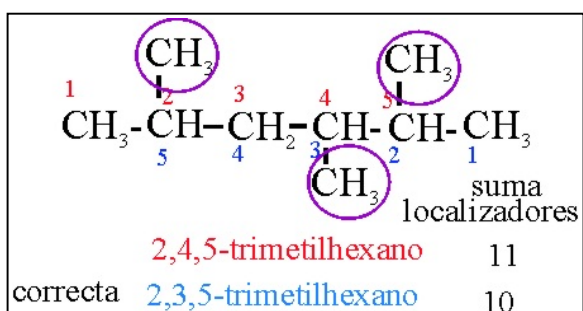
Regla A-2.1.

Los hidrocarburos alicíclicos ramificados, se nombran, precedidos del nombre de las cadenas laterales, presentes en la cadena más larga.

Regla A-2.2.

La cadena mas larga se numera de principio a fin con números arábigos, eligiendo la dirección, de forma que las cadenas laterales presenten los números más bajos posible. Si tuvieran el mismo número, se compararía término a término hasta encontrar la posición mas baja, independientemente de la naturaleza de los sustituyentes.

Véase el ejemplo 16



Ejemplo 16

Reglas aplicadas:

A-2.1. Cadena más larga: sucesión de carbonos lo mayor posible

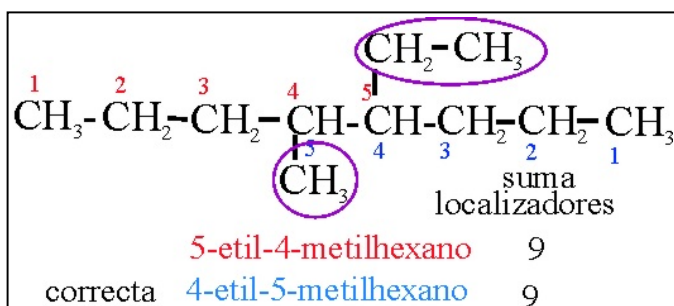
A-2.2

Si se comienza por la derecha, los localizadores son: 2, 3 y 5 cuya suma es 10. Si por la izquierda son: 2, 4 y 5, cuya suma es 11. Por lo tanto se debe comenzar por la derecha.

Regla A-2.3

Si dos o mas cadenas laterales tienen diferente naturaleza, deberán citarse en orden alfabético, como sigue.

Véase el ejemplo 17.



Reglas aplicadas:

A-2.1

A-2.2

Si se comienza por la derecha, los localizadores son: 4 y 5 cuya suma es 9. Si por la izquierda, también suman 9.

A-2.3

Predomina la clasificación alfabética, y la e está antes que la m, por lo tanto al etil debe ir el número mas bajo, por lo que se numera por la derecha.

Ejemplo 17

Las ramificaciones se nombrarán alfabéticamente, prescindiendo de los prefijos numéricos que puedan modificarlos, así un metil, estará en un nombre delante de un dipropil, pero detrás de un isopropil y de su numeración por localizadores. Todo ello está expresado en las siguientes reglas:

Regla A-2.3i

Los nombres de los radicales simples, primero se alfabetizan y se insertan con los prefijos multiplicativos necesarios ( di, tri, etc).

Regla A-2.3ii

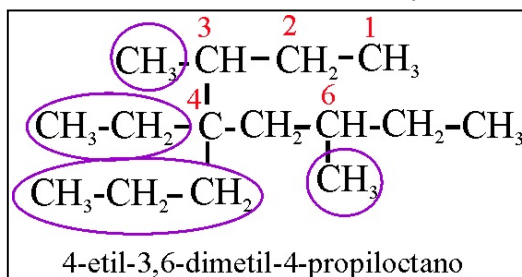
El nombre de un radical complejo, se considera por la primera letra de su nombre completo.

Regla A-2.3iii

En el caso de nombre de radicales complejos formados por palabras idénticas, tendrá prioridad en la citación el radical que contiene el localizador mas bajo.

Veamos el ejemplo 18

Ejemplo 18



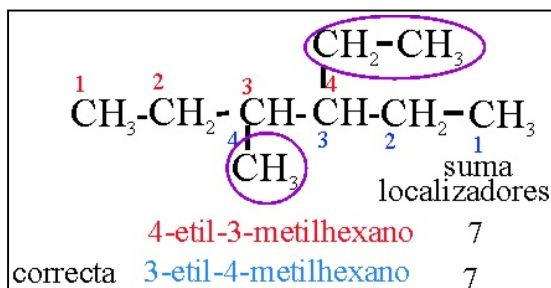
Reglas aplicadas:

A-2-2.  
Referencia al comienzo de la numeración de la cadena principal.  
A-2-3-i.  
Referencia a la disposición alfabética de los radicales.

Regla A-2.4.

Si hay dos o mas cadenas laterales que tienen posiciones equivalentes, la primera en asignarse es la citada en primer lugar según su nombre

Ejemplo 19



Reglas aplicadas:

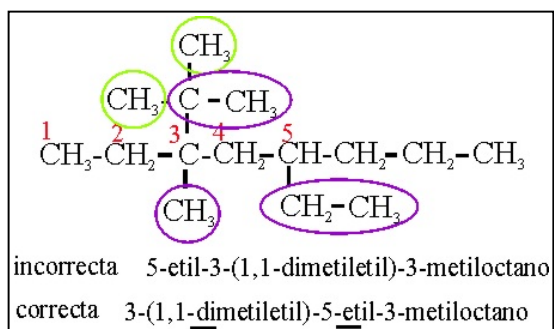
A-2-2.  
Referencia al comienzo de la numeración de la cadena principal.  
A-2-3-i.  
Referencia a la disposición alfabética de los radicales.  
A-2-4  
Referencia al cambio de orden según letra inicial

Sin embargo si existen radicales complejos, no se seguirán los principios anteriores, sino que contará la primera letra, como se ha dicho en la regla A-2.3iii

Así en el ejemplo 15, etil estaba antes que dimetil y éste que propil.

Si los radicales fueran, (1,1-dimetiletil), etil y metil, el orden sería éste, o sea que contaría la d antes que la e.

Ejemplo 20



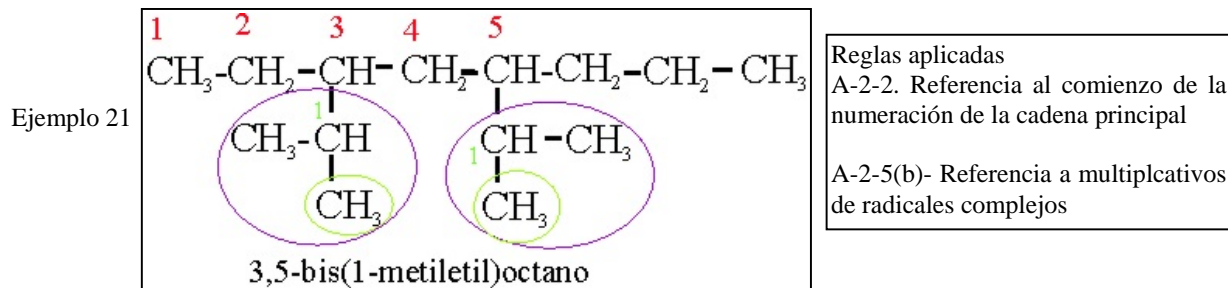
Reglas aplicadas:

A-2-2. Referencia al comienzo de la numeración de la cadena principal.  
A-2-3-ii. Referencia a la disposición alfabética de los radicales, cuando son complejos.

Cuando existen radicales complejos repetidos, se nombra con unos prefijos multiplicativos de grupos, tal como los que se emplearán en la nomenclatura inorgánica (bis=2; tris=3; tetrakis=4 , pentakis=5, etc).(Regla A.2.5<sup>149</sup>)

<sup>149</sup> La regla A-2.5, dice textualmente: “La presencia de radicales idénticos en la misma cadena, se indican con prefijos multiplicativos: bis, tris, tetrakis, pentakis etc. La expresión completa de la cadena lateral puede encerrarse entre paréntesis, o los átomos de los carbonos de las cadenas laterales pueden indicarse con números primados”.

También se pueden expresar con números primados, en este caso no harían falta paréntesis, y el nombre anterior sería: 3,5-bis-1'-metiletiloctano.



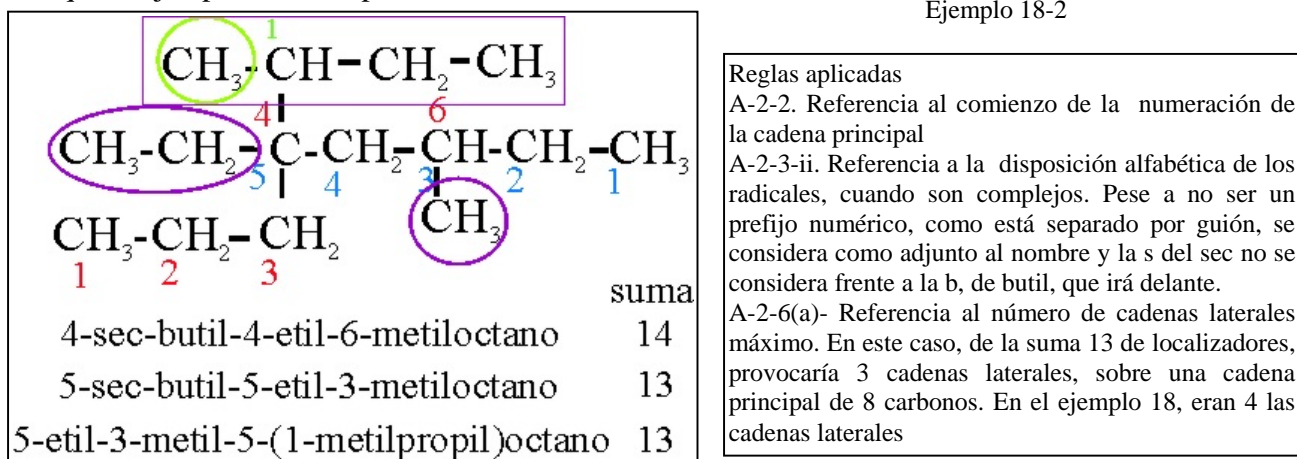
Cuando existen varias posibilidades de cadena principal, la regla A-2-6, determina la elección:

Regla A-2.6

*Si existen varias cadenas de igual longitud, la selección de la cadena principal se hará de la manera siguiente:*

- a) La que tenga mayor número de cadenas laterales
- b) La que tenga cadenas laterales con localizadores más bajos
- c) La cadena con mayor número de carbonos en las cadenas laterales más pequeñas
- d) La cadena con cadenas laterales lo menos ramificadas

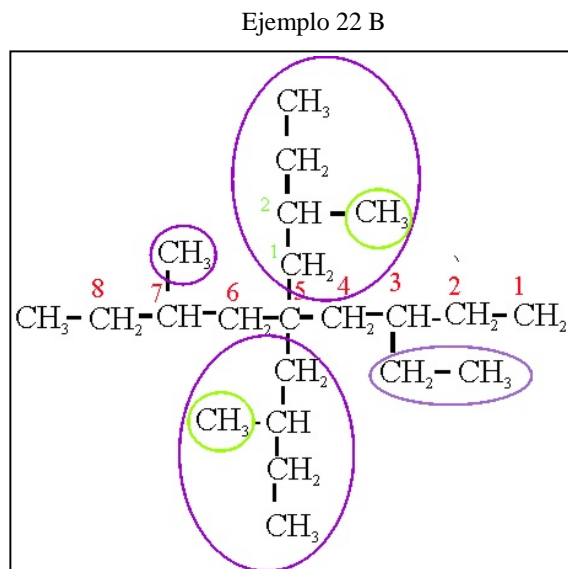
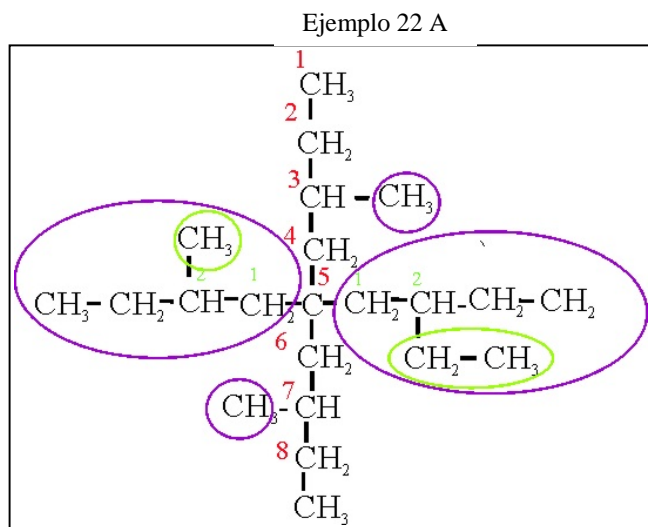
Por qué el ejemplo 18 no se podría formular tal como el 18-2



El problema surgirá con el orden de alfabetización de las ramificaciones, dado que estas se pueden nombrar como radicales complejos con paréntesis, con números primados, o simplemente como formas isoméricas. Así en el caso anterior, sumando 13 los localizadores, se tienen dos nombres con el ordenamiento de las cadenas laterales. En los primeros casos el sec-butil irá delante, mientras que en el último irá detrás, al disponerlo como radical complejo, por lo tanto se tienen dos nombres permitidos para el mismo compuesto.

Aplicación de las reglas anteriores

Veamos el ejemplo 22, en dos versiones. 22 A, y 22 B, correspondiente al mismo compuesto.



Se va a elegir su nombre, de acuerdo con las reglas ya enunciadas.

En el caso A, la cadena principal se orienta verticalmente. Las ramificaciones salen de localizadores simétricos, de forma que puede comenzar la numeración desde cualquiera de las dos posiciones. Hay 4 ramificaciones, 2 pequeñas y 2 complejas. Su nombre sería:

22 A: 3,7-dimetil-5-(2-etilbutil)-5-(2-metilbutil)-nonano

En el caso B, la cadena principal se orienta horizontalmente. Las ramificaciones salen de localizadores simétricos, de forma que puede comenzar la numeración desde cualquiera de las dos posiciones. Hay 4 ramificaciones, 2 pequeñas y 2 complejas. Su nombre sería con alfabetización según regla A-2.3ii y A-2.5b:

22 B: 3-etil-7-metil- 5,5-bis(2-metilbutil)-nonano

En ambos casos hay:

9 carbonos en la cadena principal= nonano

4 cadenas laterales: empate al aplicar la regla A-2.6a

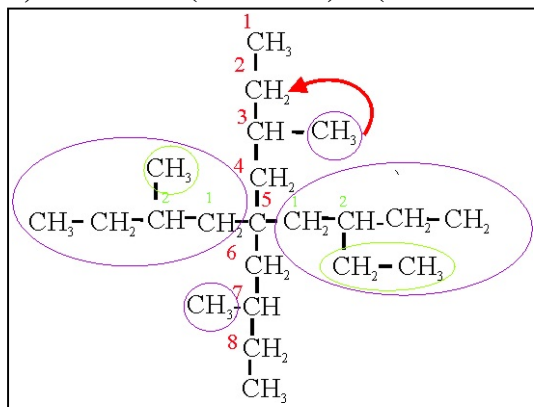
Suma de localizadores: 22 A (20); 22 B (20): empate al aplicar la regla A-2.6b

En la 22 A, las cadenas laterales pequeñas tiene 1 C, en la 22 B, estas cadenas tienen 1 y 2C, por aplicación de la regla A-2.6c, se eligen el modelo 22 B, como nombre del compuesto.

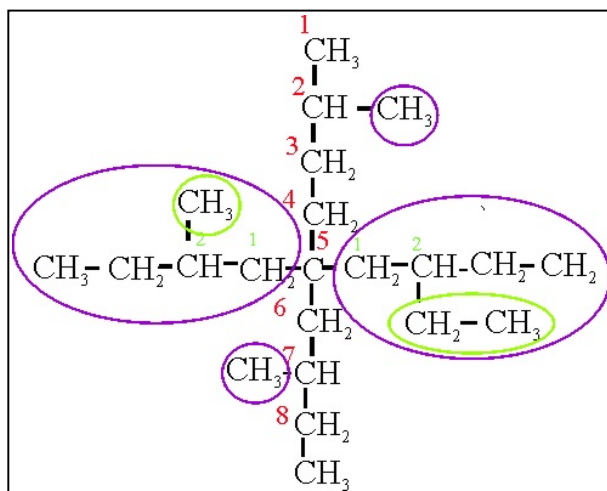
**Nombre del compuesto: 3-etil-7-metil- 5,5-bis(2-metilbutil)-nonano**

Simplemente con cambiar la posición del metilo(3), en el ejemplo 22 D, la cadena principal ya sería la del 22 A. Por aplicación de A-2.6b y su nombre será:

**2,7-dimetil-5-(2-etilbutil)-5-(2-metilbutil)-nonano**



Ejemplo 22 C

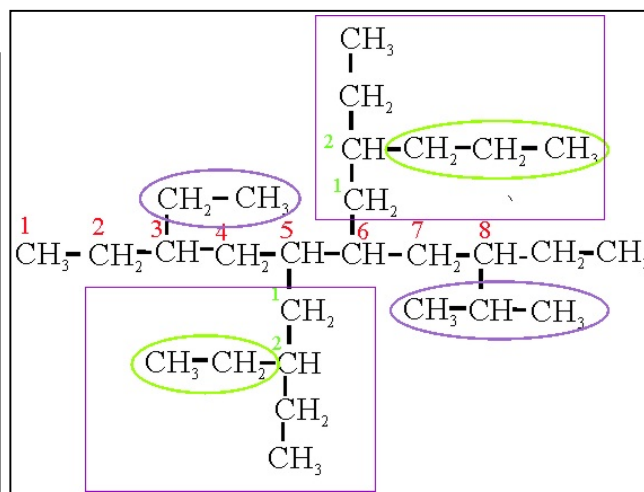
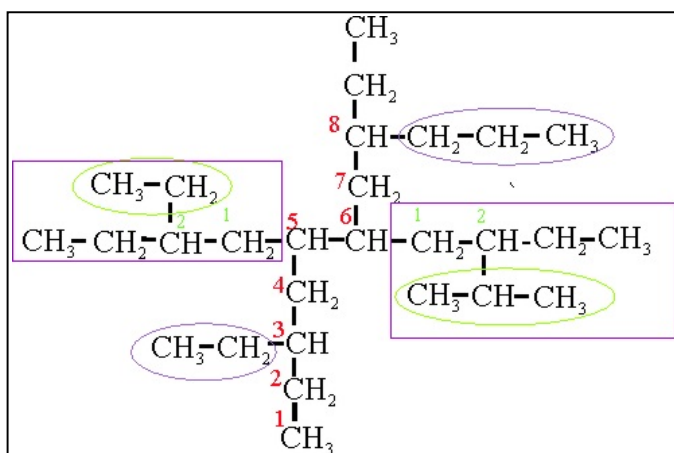


Ejemplo 22 D

Ejemplos 23 A y 23 B, sobre el mismo compuesto

Ejemplo 23 B

Ejemplo 23 A



Se va a elegir su nombre, de acuerdo con las reglas ya enunciadas.

En el caso A, la cadena principal se orienta verticalmente. Las ramificaciones salen de localizadores simétricos (3,5,6 y 8), de forma que puede comenzar la numeración desde cualquiera de las dos posiciones. Hay 4 ramificaciones, 2 pequeñas y 2 complejas. Su nombre con alfabetización según reglas A-2.3ii y A-2.5b sería:

22 A: 3-etil-5-(2-etilbutil)-6-(2-isopropilbutil)-8-propildecano

En el caso B, la cadena principal se orienta horizontalmente. Las ramificaciones salen de localizadores simétricos, 3,5,6 y 8, de forma que puede comenzar la numeración desde cualquiera de las dos posiciones. Hay 4 ramificaciones, 2 pequeñas y 2 complejas. Su nombre sería con alfabetización según reglas A-2.3ii y A-2.5b:

22 B: 3-etil-5-(2-etilbutil)- 8-isopropil-6-(2-propilbutil)-decano

En ambos casos hay:

9 carbonos en la cadena principal= nonano

4 cadenas laterales: empate al aplicar la regla A-2.6a

Suma de localizadores: 23 A (23); 23 B (23): empate al aplicar la regla A-2.6b

En ambos casos, las cadenas laterales pequeñas tiene 2 y 3 C: empate al aplicar la regla A-2.6c.

La aplicación de la regla A-2.6d, se elige el modelo B, prefiriendo el propil al isopropil mas ramificado como nombre del compuesto.

Su nombre será por lo tanto: **3-etil-5-(2-etilbutil)- 8-isopropil-6-(2-propilbutil)-decano**

Las reglas A-3, hacen referencia a los hidrocarburos insaturados

A-3.1

*“Los hidrocarburos acíclicos insaturados no ramificados, con un doble enlace, se nombran sustituyendo el sufijo ano, correspondiente al saturado por eno. Si hubiera mas de un doble enlace, lo haría por “adieno”, “atrieno” etc. Los nombres genéricos de estos hidrocarburos(ramificados o no ramificados), son “alqueno”, “alcadieno”, alcatrieno” etc. La cadena se numerará, de forma que los dobles enlaces tengan los números más bajos. En compuestos cíclicos o en sus derivados, si los localizadores de un doble enlace difieren en una unidad, sólo se citará el inferior en el nombre. Si difieren en mas, se citarán entre paréntesis, uno detrás del otro”.*

A-3.2

*“Los hidrocarburos acíclicos insaturados no ramificados, con un triple enlace, se nombran sustituyendo el sufijo ano, correspondiente al saturado por ino. Si hubiera mas de un triple enlace, lo haría por “adiino”, “atriino” etc. Los nombres genéricos de estos hidrocarburos(ramificados o no ramificados), son “alquino”, “alcadiino”, alcatriino” etc. La cadena se numerará, de forma que los*

triples enlaces tengan los números más bajos. Solo se citará el localizador más bajo para el triple enlace, en el nombre del compuesto”.

#### A-3.3

“Los hidrocarburos acíclicos insaturados no ramificados, con dobles y triples enlaces, se nombran sustituyendo el sufijo ano, correspondiente al saturado por “enino”, “adienino”, “atrienino”, “enodiino” etc. La cadena se numerará, de forma que los dobles y triples enlaces tengan los números más bajos, aunque esto produzca un localizador de un ino inferior a un eno. Cuando se pueda elegir entre ambos, siempre el eno tendrá el número más bajo”.

#### A-3.4

“Los hidrocarburos acíclicos insaturados ramificados, con dobles y triples enlaces, se nombran como los no ramificados, de forma que contenga el mayor número de dobles y triples. Si hubiera dos o más cadenas compitiendo por una elección:

1°. La que tenga mayor número de carbonos

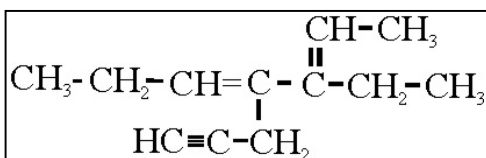
2°. La que contenga el mayor número de dobles enlaces.

En todo caso se aplicarán los mismos principios que en los hidrocarburos saturados ramificados. La cadena será numerada de forma que a los dobles y triples enlaces le corresponda la numeración más baja, de acuerdo con la regla A-3.3

Así los ejemplos dados en la primera parte, correspondientes a la nomenclatura de Ginebra se denominaría así por aplicación de estas reglas

	Ginebra	Reglas 1979
Ejemplo 2	metil-2-penteno 3	4-metil-2-penteno
Ejemplo 3	penteno 3- ino 1	3-penten-1-ino

Veamos el ejemplo 24

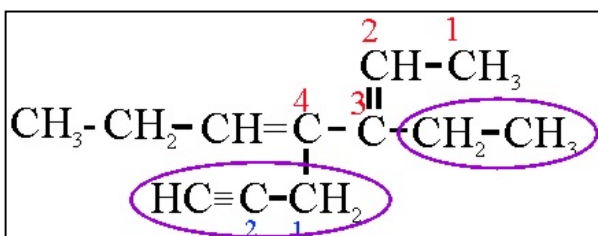


Reglas aplicadas

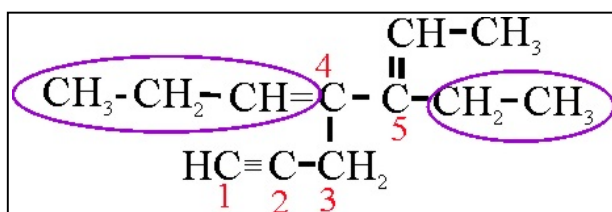
A-3-3. Referencia a la elección de la cadena principal  
Situación de empate en la A-3.3.1 y A-3.3.2

Hay dos posibilidades de cadena principal, con el máximo número de insaturaciones, y máximo número de carbonos. Será la 24 A y la 24 B

Ejemplo 24 A



Ejemplo 24 B



Dado que se da preferencia a los dobles enlaces sobre los triples, se elige como cadena principal la 24 A.

El tercer paso es la numeración, que debe ser mínima para los dobles y triples enlaces. La numeración que se da en la 24 A, proporciona unos localizadores 2, y 4 para dobles enlaces. Si comenzase por la posición opuesta, sería 3 y 5. Por lo tanto su nombre será: **3-etil-4-(2-propinil)-2,4-heptadieno**.

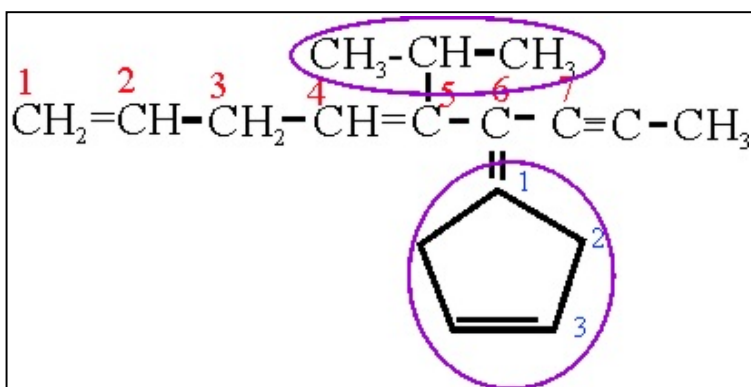
Las normas A-3.5 y A-3.6, se dedican a estudiar los radicales insaturados, y no modifican las normativas anteriores ya explicadas.

Las normas A-4, se dedican a radicales polivalentes.

La A-11, a ciclos y radicales de ciclos. Se deberá tener en cuenta que en este caso la posición del radical, será numerada con el 1.

Veamos el ejemplo 25

Ejemplo 25



Reglas aplicadas

A3.4.

Si se comienza por la derecha, el triple enlace sería el C2, y los dobles estarían en 5, 8, sumando 15. Tal como está numerada, suman 12.

Así sobre el C5, habrá un isopropil o (metiletil) y sobre el C6, con una unión doble un ciclopentenil, que por ese motivo se denominará ciclopentenilideno.

A11.

Numera el doble enlace del radical, a partir de la inserción de la ramificación, en la posición 3, será por lo tanto 3-ciclopentenilideno

Su nombre será: **6-(3-ciclopentenilideno)-5-isopropil-1,4-nonadieno-7-ino**

Las reglas A-12 y A13, hacen referencia a los núcleos aromáticos y derivados. De aquí en adelante, se presentan compuestos no usuales en las enseñanzas medias: A-20.... Policiclos; A-30... hidrocarburos con puente; A-40.. hidrocarburos espiránicos; A-50... asociación de anillos.

En el bloque A-12. Las A-12.1 y A-12.2 hacen referencia a los derivados del benceno con nombres triviales.

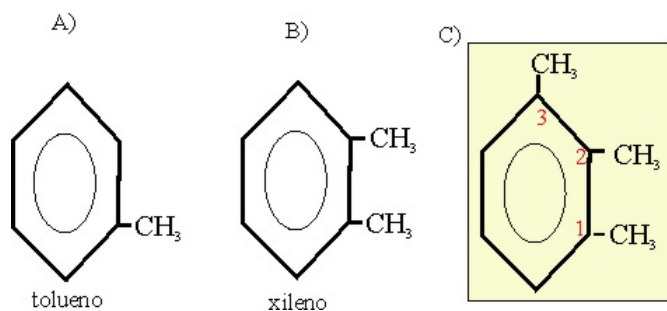
La A-12.3, es importante y dice así: “La posición de los sustituyentes será indicada por números excepto que se usen los términos *o*- (“orto”), *m*- (“meta”) y *p*- (“para”), para las posiciones 1,2; 1,3 y 1,4 respectivamente, sólo para el caso de que existan dos. Los sustituyentes tendrán los números mas bajos posibles, y se regularán por la regla A-2, excepto para aquellos compuestos que partan de nombres triviales, cuyos sustituyentes tendrán prioridad al ser numerados”.

Veamos los ejemplo 26 y 27

Se quiere formular el compuesto en recuadro

Y se puede partir de sus derivados con nombres triviales

Ejemplo 26



Reglas aplicadas

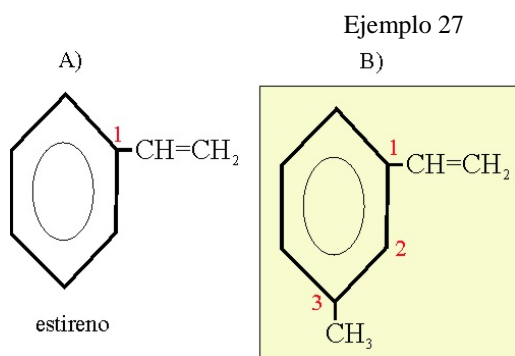
A-12-3. la nomenclatura orto, meta y para, sólo se puede aplicar cuando hay dos sustituyentes.

Se puede nombrar **1,2,3-trimetilbenceno**

No :

o-metil-xileno  
dimetil-tolueno





**Reglas aplicadas**

A-12-3. Comola nomenclatura orto, meta y para se puede aplicar cuando hay dos sustituyentes.

Se puede nombrar dando la posición 1 al sustituyente de su nombre trivial.

**Meta-metilestireno o 3-metilestireno o**

**1-metil-3-vinil-benceno** (empleando las dos ramificaciones, y por aplicación de la A-2.2, para la alfabetización, ya que no se parte del nombre trivial.

Esta regla anula, la que existía para tres sustituyentes en el núcleo bencénico, en vecinal (1,2,3), "vec", simétrico (1,3,5) "sim", y asimétrico (1,2,5) "asim".