

FORMULACIÓ I NOMENCLATURA DELS COMPOSTOS ORGÀNICS

1. Hidrocarburs saturats o alcans

S'anomenen alcans els compostos de carboni i hidrogen on tots els enllaços són senzills. Es classifiquen en:

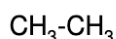
- 1.1. Alcans lineals.
- 1.2. Alcans ramificats.
- 1.3. Cicloalcans.

1.1. Alcans lineals

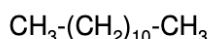
S'anomenen amb un prefix que indica el nombre d'àtoms de carboni i el sufix "à" que indica que és un hidrocarbur saturat.

Exemple: hexà hexa (en grec "sis") + à

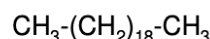
Els primers de la sèrie reben el nom de metà (1C),età (2C), propà (3C) i butà (4C). Els termes superiors utilitzen els prefixos grecs: pentà (5C), hexà (6C), heptà (7C), octà (8C), nonà (9C), decà (10C), undecà (11C), dodecà (12C), tridecà (13C), tetradecà (14C), pentadecà (15C), hexadecà (16C), eicosà (20C), etc.



età



dodecà



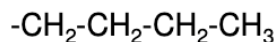
eicosà

1.2. Alcans ramificats

Consten d'una cadena lineal principal i diferents substituents o radicals. Per anomenar-los, s'escull com a cadena principal la més llarga i es numera d'un a l'altre extrem, començant per aquell que doni els valors més baixos al número locatiu o fita. Per anomenar els radicals o substituents tant sols s'ha de canviar l'acabament "-à" del nom de l'hidrocarbur relacionat, pel sufix "-il".



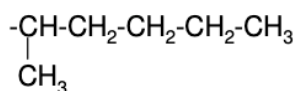
metil



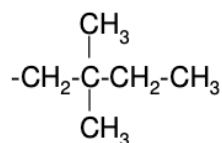
butil

Per radicals ramificats s'utilitza el mateix sistema, indicant el nom del substituent de la ramificació i la posició que ocupa, comptant sempre a partir del carboni que ha perdut l'hidrogen i a través del qual el radical s'uneix a la cadena principal.

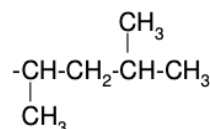
Exemples:



1-metilpentil



2,2-dimetilbutil



1,3-dimetilbutil

Hi ha també uns quants **radicals ramificats** que tenen **nom propi admès** per la I.U.P.A.C., són:

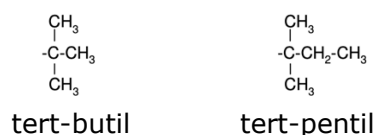
a. Amb prefix "**iso**", que indica un extrem amb dos grups metil units a un mateix carboni.



b. Amb prefix "**sec-**" (amb lletra cursiva), que indica que el radical té un grup metil en la posició 1 (C secundari).



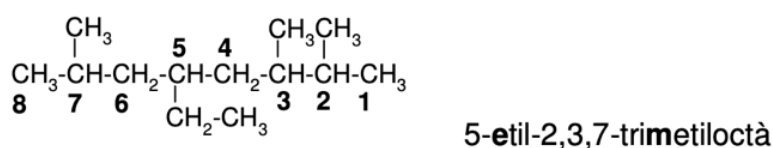
c. Amb prefix "**tert-**" (amb lletra cursiva), que indica que el radical té dos grups metil en la posició 1 (C terciari).



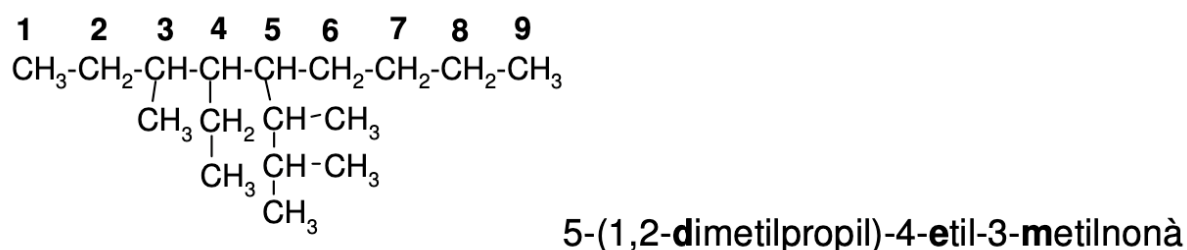
El criteri recomanat per la I.U.P.A.C. per a la citació dels radicals és la utilització de l'ordre l'alfabètic, amb les següents particularitats:

a/ Els radicals o substituents amb nom senzill s'anomenen per ordre alfabètic sense tenir en compte els prefixos di, tri, tetra, etc.

Exemple:

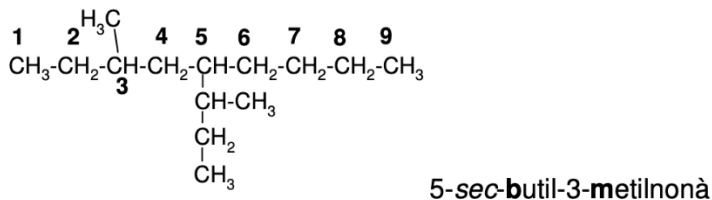


b/ Els radicals complexos s'ordenen per la primera lletra del radical i s'indiquen entre parèntesi (aquí **si** es tenen en compte els prefixos di, tri, etc.



c/ Els prefixos *sec-* i *tert-*, i en general tots els prefixos que s'escriuen separats per guionet, són ignorats. El prefix *iso* s'escriuen tot seguit i no s'ignora.

Example:

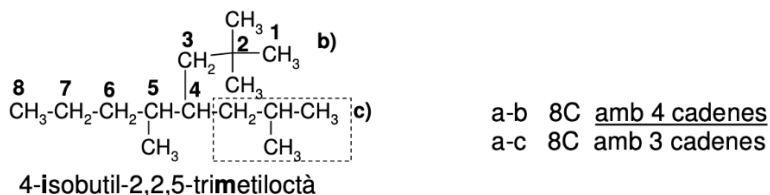


d/ Per evitar confusions amb els prefixos senzills di, tri, tetra, etc., per als radicals ramificats s'utilitzen els prefixos bis, tris, tetrakis, etc.. Aquests prefixos **sí** es tenen en compte en l'ordre alfabètic.

Quan tenim dues possibles cadenes principals, és a dir, dues cadenes de la mateixa llargària:

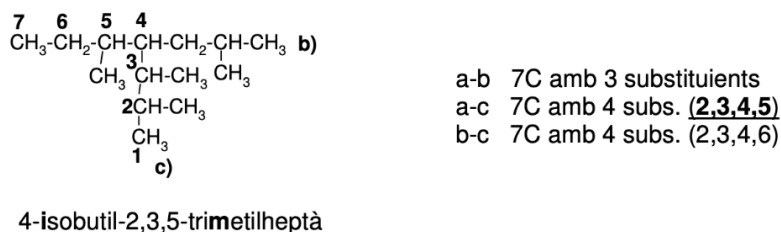
a. Es tria com cadena principal la que té un major nombre de cadenes laterals.

Example:

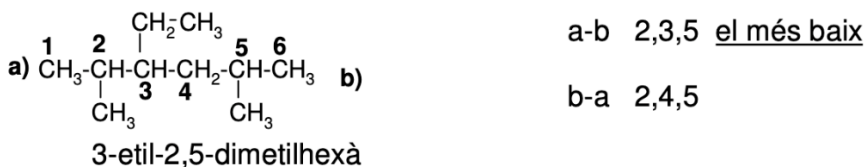


b. En cas d'igualtat en el nombre de substituents, s'escull la cadena en la que els radicals tenen les fites més baixes.

Example:



L'ordre de les fites es mira sempre de forma consecutiva començant per ambdós extrems de la cadena, intentant que sigui el més baix possible i sense tenir en compte l'ordre final en què s'anomenaran els substituents i que dependrà només de l'ordre alfabètic.



1.3. Cicloalcans

Els hidrocarburs saturats d'estructura cíclica s'anomenen afegint el prefix **ciclo-** al nom del corresponent alcà de cadena oberta.



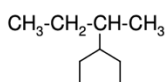
ciclohexà



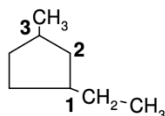
ciclobutà

Per anomenar cicloalcans monosubstituïts hi ha la possibilitat de considerar el cicle com una ramificació de la cadena principal de l'alcà acíclic, o bé prendre el cicle com a sistema bàsic i l'alcà acíclic com a substituent.

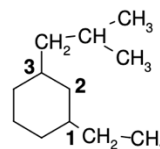
Quan són diverses les cadenes obertes unides a un cicle és recomanable considerar el cicle com a component principal; mentre que en els alcans amb dos o més cicles (o amb força cadenes i cicles) és millor basar-se en la cadena oberta més llarga. També s'utilitzen fites per a localitzar els substituents. Com sempre, s'intenta que les fites siguin el més baixes possible, i quan és igual numerar per un o l'altre costat es comença pel substituent que s'anomena primer.



2-ciclopentilbutà
sec-butilciclopentà



1-etil-3-metilciclopentà



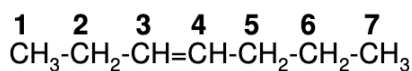
1-etil-3-isobutilciclohexà

2. Hidrocarburs insaturats

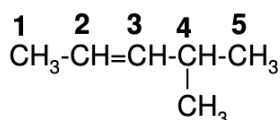
2.1. Alquens

Els hidrocarburs que contenen un doble enllaç C-C s'anomenen com els alcans d'igual nombre d'àtoms de carboni però canviant la terminació "à" per "è".

Quan la cadena és llarga, per tal de distingir els diferents isòmers possibles, la posició del doble enllaç s'indica amb una fita que s'escriu davant del nom separada per un guionet. En aquest cas la cadena carbonada s'ha de numerar procurant que el doble enllaç tingui les fites el més baixes possible, independentment de la posició dels substituents (si n'hi ha).

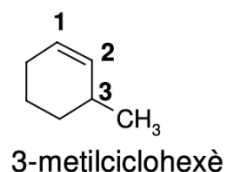
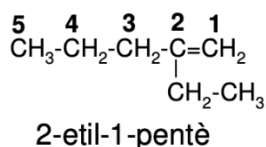


3-heptè



4-metil-2-pentè

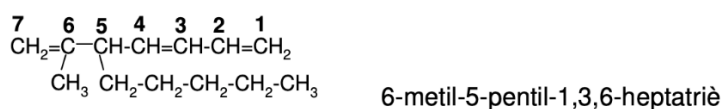
En cas que hi hagi ramificacions, cal agafar sempre com a cadena principal la més llarga d'entre les que contenen el doble enllaç.



2.2. Hidrocarburs amb més d'un doble enllaç C-C

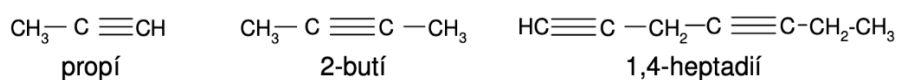
Per anomenar un hidrocarbur que conté més d'un doble enllaç C-C, s'afegeixen les terminacions **diè**, **triè**, etc. al prefix corresponent i es localitza la seva posició amb les fites corresponents.

La cadena principal ha d'ésser la més llarga d'entre les que contenen tots els dobles enllaços i es numera, com hem dit abans, sense tenir en compte els substituents. La cadena es numerarà de manera que els dobles enllaços tinguin les fites més baixes.

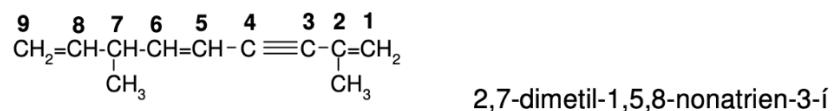


2.3. Alquins

Els noms dels hidrocarburs amb triples enllaços C-C acaben amb "**í**":



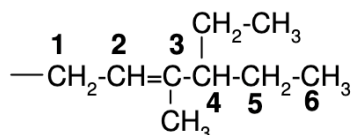
Quan als hidrocarburs que contenen dobles i triples enllaços ahora, s'han d'anomenar **primer els dobles** i **després els triples**. S'ha de procurar que les fites més baixes corresponguin a les insaturacions i en cas d'igualtat es dona preferència als dobles enllaços enfront dels triples.



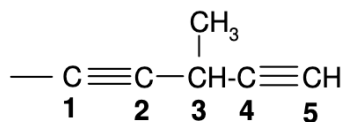
Si tenim insaturacions en les cadenes laterals, escollirem la cadena principal seguint els següents criteris per ordre de preferència:

1. La cadena amb major nombre d'insaturacions (dobles o triples enllaços).
2. La cadena més llarga.
3. La cadena amb més enllaços dobles.

Per anomenar els radicals insaturats se segueix la mateixa nomenclatura que per als derivats dels alcans: terminació **en**, **dien**, etc. + **il** o bé **in**, **diin**, etc. + **il** per als triples enllaços.



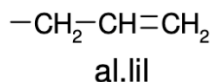
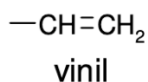
4-etil-3-metil-2-hexenil



3-metil-1,4-pentadiinil

Aquests radicals permeten anomenar hidrocarburs insaturats complexos.

Hi ha alguns radicals insaturats molt corrents que reben noms no sistemàtics; els més importants són:

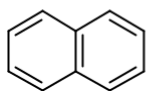


3. Hidrocarburs aromàtics

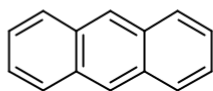
Els hidrocarburs aromàtics són aquells que deriven del benzè i dels seus homòlegs superiors: naftalè, antracè, fenantrè, etc..



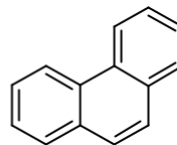
benzè



naftalè



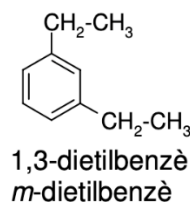
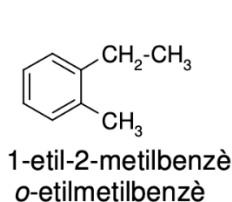
antracè



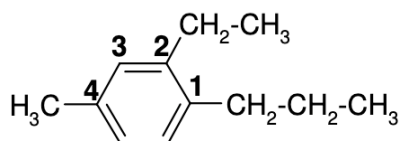
fenantrè

La forma correcta d'anomenar els anells benzènics substituïts consisteix en anteposar el nom del radical o substituent a la paraula benzè.

Quan hi ha dos substituents, la posició relativa es pot indicar mitjançant els números 1,2-, 1,3-, ó 1,4- o també mitjançant els prefixos *o-* (*orto*), *m-* (*meta*) i *p-* (*para*).

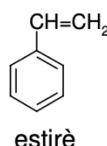
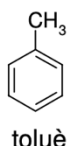


Si el nombre de substituents és 3 o més, cal numerar consecutivament els carbonis de l'anell, tot procurant que els números que corresponguin als substituents siguin el més petits possible.

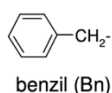
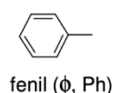


2-etil-4-metil-1-propilbenzè

En la sèrie aromàtica hi ha molts noms trivals admesos per la IUPAC; alguns dels més importants són:

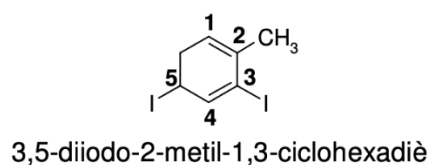
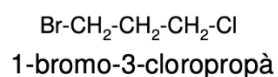
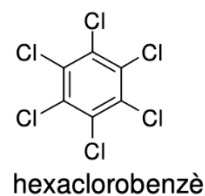
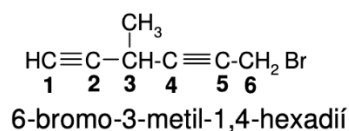
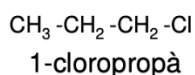


Com a radicals aromàtics més corrents, que reben nom no sistemàtic, tenim:

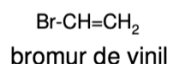
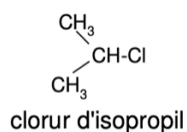


4. Hidrocarburs halogenats

El mètode més general per a anomenar-los consisteix en anteposar un prefix derivat del nom de l'halogen present (**fluoro**, **cloro**, **bromo**, **iodo**) al nom de l'hidrocarbur de referència.



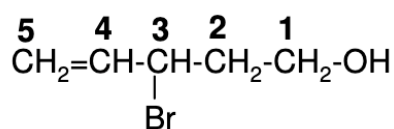
També es poden anomenar com halurs dels radicals corresponents (és a dir, com "halurs d'alquil"). Aquesta nomenclatura es fa servir sobretot en els termes més senzills.



5. Grups funcionals

Els grups funcionals són habitualment els punts reactius de les molècules orgàniques i es caracteritzen per tenir enllaços C-O, C=O, C-N, C=N, C≡N, C-S, etc..

Quan un compost té en la seva estructura un grup funcional, aquest esdevé la part més important de la molècula i, per tant, la cadena es numerarà de forma que el grup funcional tingui les fites més baixes independentment de la posició dels dobles i triples enllaços o dels halògens.



3-bromo-4-penten-1-ol

Els principals criteris per a anomenar els compostos amb grups funcionals són els següents:

- a. La cadena principal dels compostos que tinguin un sol grup funcional haurà de contenir aquesta funció. La cadena principal s'haurà de numerar de tal forma que la fita de la funció sigui el més baixa possible. El compost en aquest cas s'anomenarà afegint una terminació pròpia per a cada grup funcional.
- b. Quan un compost tingui més d'un grup funcional, caldrà decidir abans quin és el grup funcional principal i anomenar la resta com a funcions substituents. L'ordre de preferència acordat per la I.U.P.A.C. és el següent:

1. Àcids carboxílics
2. Anhídrids
3. Èsters
4. Halurs d'acil
5. Amides
6. Nitrils

7. Aldehids
8. Cetones
9. Alcohols
10. Fenols
11. Amines
12. Èters

La cadena principal escollida haurà de contenir sempre la funció preferent. Les altres funcions seran anomenades com a substituents, és a dir, seran citades per ordre alfabètic. La posició de tots els grups funcionals, tant principals com secundaris, s'ha d'indicar amb una fita.

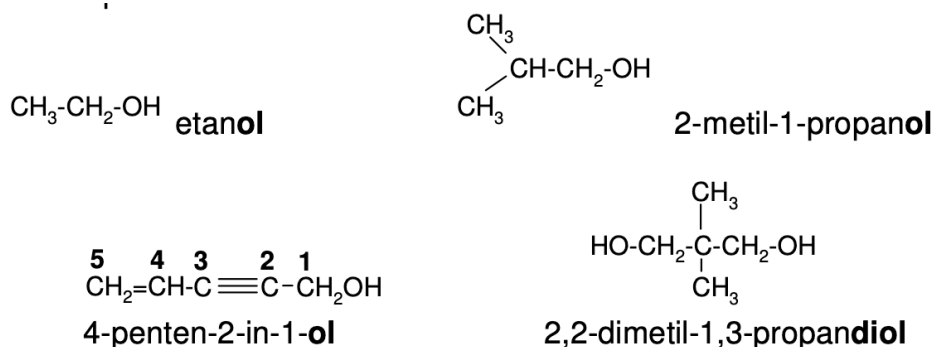
A l'hora de determinar les fites, s'ha de tenir present que els grups funcionals principals tenen preferència sobre els dobles i triples enllaços.

És imprescindible conèixer i saber identificar tots els grups funcionals de la llista anterior.

Cada grup funcional té una terminació i una denominació característiques. La terminació es fa servir quan ens referim al grup funcional com a funció principal de la molècula, mentre que la denominació la farem servir quan es tracti d'una funció secundària.

5.1. Alcohols: R-OH (-ol , hidroxi)

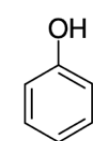
S'anomenen afegint el sufix **-ol** al nom de l'hidrocarbur de referència, sense deixar-se la "n" etimològica. La posició de l'alcohol s'ha d'indicar mitjançant el número corresponent.



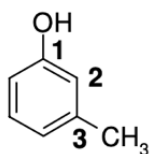
Quan un grup -OH es troba en una molècula amb un grup funcional que tingui preferència s'utilitza el prefix **hidroxi-**

5.2. Fenols: Ar-OH (-ol, hidroxi)

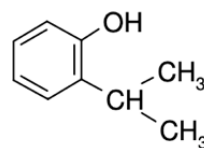
Encara que tenen la mateixa nomenclatura que els alcohols, els fenols constitueixen un grup funcional diferent degut a les seves propietats particulars que els diferencien dels alcohols. En els fenols el grup "hidroxil" (**-OH**) sempre està unit directament a un anell aromàtic. Es consideren derivats del terme més senzill que és el fenol:



fenol



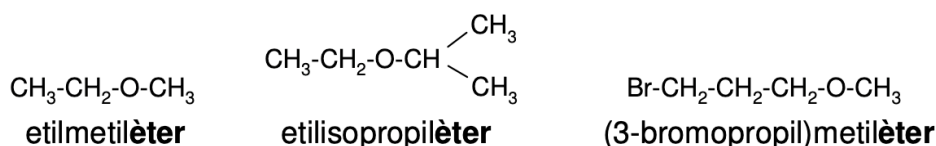
3-metilfenol



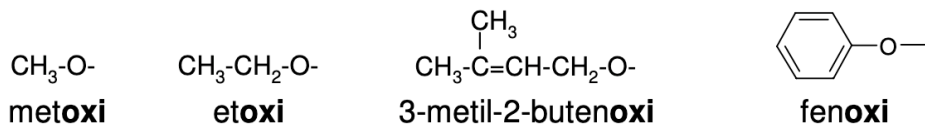
2-isopropilfenol

5.3. Èters: C-O-C (-èter, oxi)

S'anomenen els radicals en ordre alfabètic seguits de la terminació **èter**.

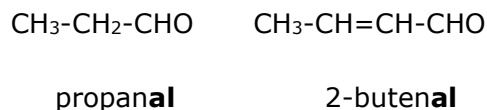


Quan s'ha d'anomenar com a substituent s'hi afegeix l'acabament **-oxi**.



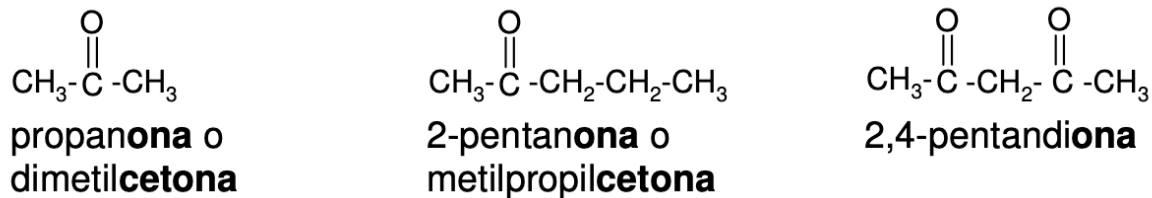
5.4. Aldehids: R-CO-H ; R-CHO (**-al, formil**)

Per indicar la presència d'un grup carbonil de tipus aldehydic s'empra el sufix **-al**. Quan és substituent s'utilitza el prefix **-formil**.

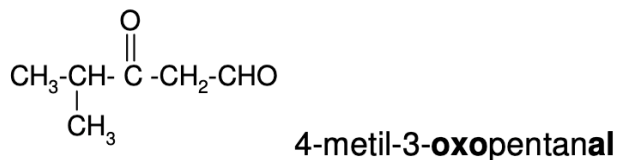


5.5. Cetones: R-CO-R (**-ona, oxo**)

Per anomenar les cetones s'utilitza el nom de l'hidrocarbur amb el sufix **-ona** o bé s'anomenen els dos radicals per ordre alfabètic i s'hi afegeix el sufix **-cetona**.



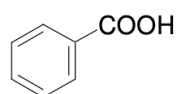
Quan el grup cetona és substituent se l'anomena mitjançant el prefix **oxo**:



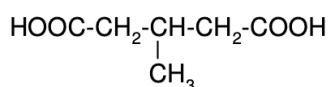
5.6. Àcids carboxílics: R-COOH (-oic, carboxi)

Els àcids carboxílics s'anomenen amb l'ajuda del sufix **-oic** unit a l'arrel característica de l'hidrocarbur. Tanmateix s'accepten alguns noms tradicionals:

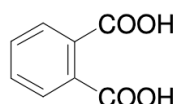
H-COOH	àcid metano ic o fòrmic
CH ₃ -COOH	àcid etano ic o acètic
CH ₃ -CH ₂ -COOH	àcid propano ic
CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -COOH	àcid butano ic



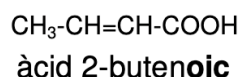
àcid benzoic



àcid 3-metilpentandio**ic**

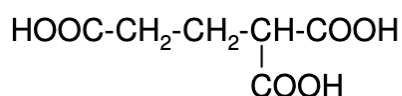


àcid ftàlic



àcid 2-buten**oic**

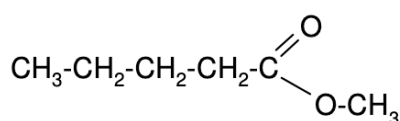
Com a substituent, la funció àcid s'anomena **carboxi-**.



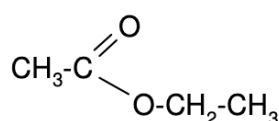
àcid 2-**carboxi**pentandio**ic**

5.7. Èsters: R-COO-R' (-at, alcoxycarbonil)

Els èsters s'anomenen canviant l'acabament -ic dels àcids dels què deriven per **-at**, indicant a continuació la cadena carbonada que reemplaça l'hidrogen de l'àcid de referència.



pentano**at** de metil



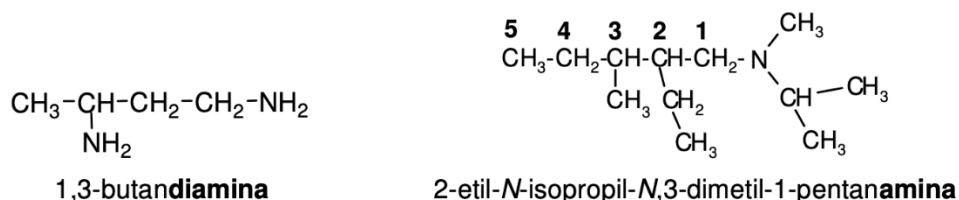
acetat d'etil

Quan el grup èster s'ha d'anomenar com a substituent, s'empren expressions del tipus **"alcoxycarbonil"**:

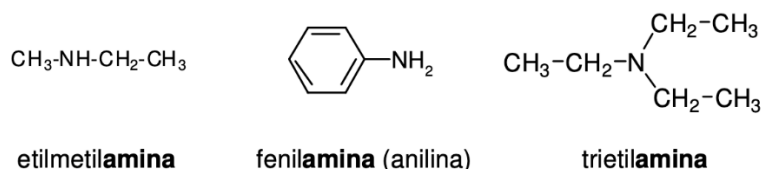
-COOCH ₃	metoxycarbonil
-COOCH ₂ CH ₃	etoxycarbonil

5.8. Amines: $R-NH_2$, $R-NH-R$, R_3N (-amina, amino-)

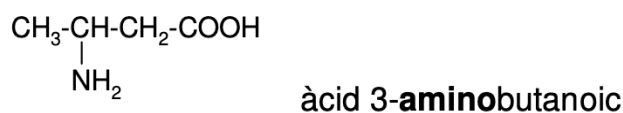
El mètode més general consisteix en afegir el sufix **-amina** a l'arrel característica de l'hidrocarbur. Per anomenar les amines secundàries i terciàries cal escollir com a cadena principal la cadena més complexa i les altres es tractaran com a substituents en el nitrogen (s'indica posant-hi davant una *N*).



Un altre mètode, aplicable només als casos més senzills, consisteix en anomenar els radicals en ordre alfabètic i afegir la terminació **-amina**.

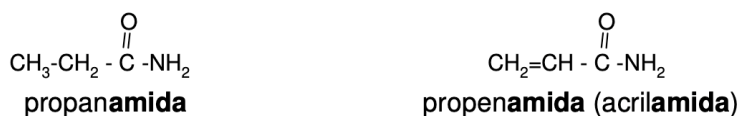


Com a substituent s'utilitza el prefix **amino-**.

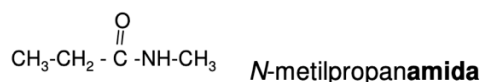


5.9. Amides: $R-CONH_2$, $R-CONHR'$, $R-CONR'_2$ (-amida, carbamoïl-)

Es substitueix la terminació de l'àcid de què deriven per la d'**amida**.



Si són substituïdes s'anteposa al nom del radical una *N*-.



Com a substituent el grup $-CONH_2$ s'anomena **carbamoïl**.

