

# Desarrollo de una fórmula general para determinar el índice de deficiencia de hidrógenos (IDH)

Jorge Haro-Castellanos,<sup>1</sup> Guillermo James-Molina,<sup>2</sup> Artemisa Romero-Martínez<sup>2</sup>

## Abstract (Development of a general formula for the calculation of the hydrogen deficiency index)

Molecular formulas give us the number and types of atoms in a molecule and the Hydrogen Deficiency Index (HDI) gives us information about unsaturations and rings. HDI is half the number of hydrogen atoms needed to represent a open chain saturated compound. We present the development of a formula for HDI calculation in any type of organic compounds with any kind of heteroatoms.

## Introducción

La fórmula molecular de un compuesto, aunque es escueta, puede proporcionar información importante acerca de sus características estructurales: la presencia o ausencia de heteroátomos y su tipo en una fórmula molecular ayuda a acotar las posibilidades de grupos funcionales presentes en el compuesto.

La relación de átomos de hidrógeno con respecto a los átomos de carbono permite determinar la presencia de enlaces múltiples (enlaces  $\pi$ ) sobre carbonos y/o ciclos presentes en la molécula, a través del concepto de Índice de Deficiencia de Hidrógenos (IDH).

Existe poca información del significado del IDH y de sus usos, pero menos sobre el cálculo de este índice para cualquier compuesto orgánico. Solomons (1988) aborda este concepto aplicado solamente a los hidrocarburos y lo define como "... el número de pares de átomos de hidrógeno que deben restarse de la fórmula molecular del alcano correspondiente para obtener la fórmula molecular del compuesto en cuestión". También se señala que "... el IDH es igual al número de enlaces dobles más el número de anillos", indicando además que "... proporciona información acerca de las posibilidades estructurales de la fórmula molecular".

En una edición moderna, Solomons (1996) adiciona, como material opcional, el cálculo del IDH para compuestos diferentes a los hidrocarburos; las reglas "relativamente fáciles..." indican que los oxígenos se ignoren, los halógenos se cambien por hidrógeno, eliminar un hidrógeno por cada átomo de nitrógeno presente y después olvidarse de él en la fórmula, acompañándolas con algunos ejemplos de aplicación.

Pine *et al.*, (1987) agregan que este concepto "...se puede extender a moléculas con cualquier tipo de átomos" y señalan sin precisión el efecto que causa la presencia de oxígeno, azufre, halógeno o nitrógeno en la fórmula molecular. En el caso del nitrógeno se presenta una regla que nos dice que "si existe un átomo de nitrógeno, hay que añadir un hidrógeno adicional a la fórmula molecular" sin mayor explicación o uso de esta regla.

El presente trabajo se ubica en el concepto de la composición, abordando una de las propiedades de la fórmula molecular, el Índice de Deficiencia de Hidrógenos (IDH), con objeto de precisar los conceptos y definición del mismo, desarrollar una fórmula general para su cálculo y aclarar sus aplicaciones.

## Discusión

En primer término consideramos que a la definición del IDH: "...el número de pares de átomos de hidrógeno que deben restarse de la fórmula molecular del alcano correspondiente para obtener la fórmula molecular del compuesto en cuestión", le falta señalar que el alcano considerado debe ser de cadena abierta (no cíclico). Por lo anterior, para generalizar y precisar, proponemos que el IDH se defina como "la mitad de la diferencia entre los átomos de hidrógeno contenidos en la fórmula molecular del compuesto considerado y los átomos de hidrógeno de la fórmula molecular del alcano acíclico con el mismo número de átomos de carbono".

Cuando Solomons (1988, 1996) y Carey (1983) señalan que "...el IDH es igual al número de enlaces dobles más el número de anillos", excluyen los triples enlaces, para lo cual nosotros precisamos que el IDH de una fórmula molecular representa la suma del número de enlaces  $\pi$  sobre carbono más el número de ciclos contenidos en la estructura molecular.

<sup>1</sup> Depto. Biología de la Reproducción, C.B.S., Universidad Autónoma Metropolitana, Plantel Iztapalapa. A.P. 55-535. México D.F. Email: hcja@xanum.uam.mx

<sup>2</sup> Depto. de Sistemas Biológicos, C.B.S., Universidad Autónoma Metropolitana, Plantel Xochimilco. A.P. 23-181. México D.F. Email: jamg42@cueyatl.uam.mx

Recibido: 19 de mayo de 2000; aceptado: 30 de noviembre de 2000.

No existe un método general sencillo para el cálculo del IDH, ya que un autor (Solomons, 1988) considera el IDH sólo para los hidrocarburos y otros (Pine *et al.*, 1987) consideran solamente un grupo más de compuestos orgánicos, los que contienen oxígeno, azufre, halógeno o nitrógeno, y Pellegrin (1983) desarrolla una fórmula general para el IDH tomando como base la ecuación de Euler y la Regla del Nitrógeno, conceptos elevados para el estudiante novato, además propone que los halógenos sean cambiados por hidrógeno o que los átomos trivalentes sean cambiados por CH, lo que hace complejo el procedimiento para el estudiante. Por lo anterior, desarrollamos una ecuación general que se aplica a las fórmulas moleculares de todos los compuestos orgánicos para determinar su IDH sin hacer cambios de átomos.

El desarrollo de la ecuación para calcular el IDH de cualquier compuesto orgánico requiere el análisis del origen de la fórmula general de los alcanos acíclicos (no cíclicos, de cadena abierta o cadena normal).

Tomando como ejemplo los alcanos de cadena normal sin ramificaciones, su fórmula general se explica de la siguiente manera: cada carbono está unido a sólo dos hidrógenos (los centrales, ver la figura 1) así que por cada carbono existirán dos hidrógenos, de lo cual resulta el  $C_nH_{2n}$  de la fórmula F-1.



Sin embargo, en una cadena normal siempre van a existir dos extremos, en los cuales cada carbono está unido a solamente un carbono, y por lo tanto tendrán tres hidrógenos enlazados, es decir un hidrógeno más (hidrógenos terminales) que los carbonos intermedios o centrales, de donde se deriva el +2 de la fórmula F-1. Esto se ejemplifica con el butano (ver la figura 1) donde cada uno de los 4 carbonos sostienen dos hidrógenos (centrales), y el primero y el último tienen uno más (hidrógenos terminales).

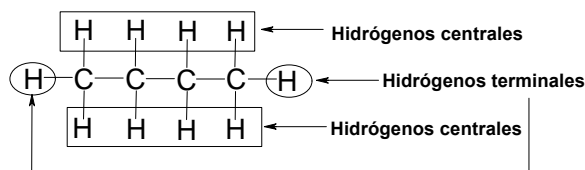


Figura 1. Butano.

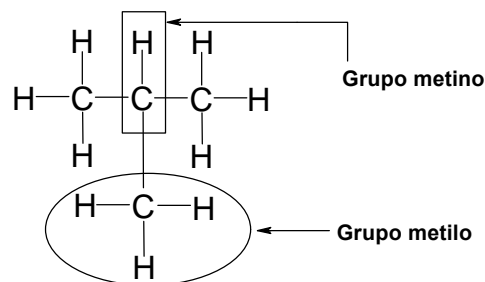


Figura 2. Isobutano

En el caso de los alcanos ramificados, cada carbono que sale de la cadena normal para convertirse en una arborescencia o sustituyente como grupo metilo, adquiere un hidrógeno más al pasar de  $-(CH_2)-$  a  $-CH_3$ . El hidrógeno que gana el  $-(CH_2)-$  al convertirse en  $-CH_3$ , lo pierde el carbono intermedio al cual está unido este nuevo sustituyente metilo, convirtiéndose de  $(CH_2)-$  a  $(-CH-)$  (grupo metino) como se ejemplifica con el isobutano (2-metilpropano, figura 2).

Con lo anterior, se demuestra que todos los alcanos acíclicos sean de cadena normal o ramificados, cumplen con la fórmula general F-1.

Está implícito en la definición de IDH que el valor numérico de este concepto para los alcanos acíclicos es de cero.

Cuando se forma un enlace  $\pi$  o un ciclo en un hidrocarburo, se hace a expensas de dos hidrógenos que se pierden en la molécula, de tal manera que en la fórmula de cualquier hidrocarburo se reflejará la presencia de los enlaces  $\pi$  unidos a carbono, más los ciclos. Como ejemplo se presenta el naftaleno (figura 3), cuya fórmula molecular es  $C_{10}H_8$ , y la fórmula del alcano de cadena abierta de 10 átomos de carbono  $C_{10}H_{22}$ .

La diferencia entre las últimas dos fórmulas es de 14 hidrógenos:

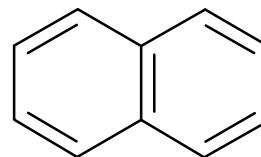


Figura 3. Hidrocarburo cíclico e insaturado.

$$C_{10}H_{22} - C_{10}H_8 = H_{14}$$

Al dividir el número total de hidrógenos entre 2, se obtiene el número 7. Éste resulta de la diferencia entre los hidrógenos del alcano de cadena abierta ( $C_{10}H_{22}$ ) con el mismo número de carbonos y los hidrógenos presentes en el naftaleno entre dos, es precisamente el Índice de Deficiencia de Hidrógenos (IDH) y representa la suma de 5 enlaces  $\pi$  + 2 ciclos contenidos en su molécula.

En las moléculas con heteroátomos, el número de hidrógenos con respecto al alcano de cadena abierta y con el mismo número de átomos de carbono puede cambiar, dependiendo de la valencia del heteroátomo y del número de ellos.

Para mostrar los cambios que los diferentes tipos de heteroátomos producen en la Fórmula Molecular de un compuesto orgánico y la repercusión en su IDH, a continuación se ilustra la inserción subsecuente de los distintos tipos de heteroátomos a un alcano de cadena abierta, con lo cual se integra la fórmula general del IDH de la siguiente manera:

1. Al insertar un átomo monovalente (X) en un compuesto orgánico, éste tomará el lugar de un hidrógeno, así que por cada átomo monovalente se pierde un hidrógeno, y la fórmula general quedará:

$$C_nH_{(2n+2-x)}X_x \quad (F-2)$$

2. Cuando un heteroátomo bivalente (Y) se incorpora a un compuesto orgánico, puede entrar entre un carbono y un hidrógeno o entre dos carbonos, pero no produce pérdida ni ganancia de hidrógenos, y por tanto la fórmula será:

$$C_nH_{(2n+2-x)}X_xY_y \quad (F-3)$$

3. Cuando se introduce un heteroátomo trivalente (Z) a un compuesto orgánico, puede entrar entre un carbono y un hidrógeno o entre dos carbonos, pero no hace que se pierdan hidrógenos; por el contrario, le queda un enlace que une a un hidrógeno y por consiguiente, por cada heteroátomo trivalente la molécula ganará un hidrógeno, por lo que la fórmula general resultará:

$$C_nH_{(2n+2-x+z)}X_xY_yZ_z \quad (F-4)$$

4. En forma análoga al anterior, por cada heteroátomo tetravalente (W) se adicionan dos hidrógenos.

$$C_nH_{(2n+2-x+z+2w)}X_xY_yZ_zW_w \quad (F-5)$$

5. Existen dos casos cuando se presentan los heteroátomos pentavalentes (A): con enlace covalente coordinado y sin enlace covalente coordinado:

(a) En el primero de estos casos, para el recuento de hidrógenos el elemento se comporta como **trivalente** y se considera en el inciso 3, ya que el enlace covalente coordinado en los compuestos orgánicos normalmente se efectúa sobre átomos de oxígeno o azufre, por lo que no se afecta al número de hidrógenos.

(b) En el segundo caso, por cada átomo pentavalente que no tenga enlace covalente coordinado ( $A_a$ ) aumenta tres unidades el número de hidrógenos; por lo anterior, la fórmula molecular queda de la siguiente manera:

$$C_nH_{(2n+2-x+z+2w+3a)}X_xY_yZ_zW_wA_a \quad (F-6)$$

6. Para el caso de átomos hexavalentes (B). En este caso siempre hay un enlace de coordinación por lo que se comportan como los átomos tetravalentes y caen dentro de ese grupo.

$$C_nH_{(2n+2-x+z+2w+3a+2b)}X_xY_yZ_zW_wA_aB_b \quad (F-7)$$

Ésta sería la fórmula para cualquier compuesto saturado y acíclico. Para hacer extensiva la ecuación a compuestos insaturados y/o cíclicos, es necesario considerar la deficiencia de hidrógenos producida por la presencia de los enlaces  $\pi$  y los ciclos presentes (IDH), y dado que por cada uno de éstos se pierden dos hidrógenos, se tendrá que introducir el valor IDH multiplicado por 2, con lo cual la ecuación queda en su forma general, de la siguiente manera:

$$C_nH_{(2n+2-x+z+2w+3a+2b-2IDH)}X_xY_yZ_zW_wA_aB_b \quad (F-8)$$

si definimos "H" como el valor total de los hidrógenos presentes en la molécula, entonces:

$$H = 2n + 2 - x + z + 2w + 3a + 2b - 2(IDH) \quad (F-9)$$

despejando el valor de IDH:

$$IDH = \frac{(2n + 2 - x + z + 2w + 3a + 2b - H)}{2} \quad (F-10)$$

compactando términos, queda finalmente la ecuación para calcular el valor del IDH en cualquier caso de compuestos orgánicos:

$$IDH = \frac{3a + 2(b + n + w + 1) + z - (x + H)}{2} \quad (F-11)$$

Finalmente para su aplicación existen dos formas de utilizar el IDH, siendo la más importante la

que conduce a caracterizar la presencia de enlaces  $\pi$  y/o ciclos en una estructura molecular a partir de la fórmula molecular, obtenida de los porcentajes de los elementos presentes, resultado de un análisis elemental. Por ejemplo, a partir de la fórmula molecular del ciclohexano,  $C_6H_{12}$ , se puede determinar que existe un enlace  $\pi$  o un ciclo, aplicando la ecuación general F-11, donde: “a”, “b”, “w”, “z” y “x”, tienen valor de cero, ya que no existe ningún heteroátomo. El valor de “n” es 6, y “H” vale 12, y con esto la ecuación general F-11 se reduce a la siguiente expresión:

$$IDH = \frac{2(n+1) - H}{2}$$

y sustituyendo los valores de “n” y “H”, queda:

$$IDH = \frac{2(6+1) - 12}{2} = \frac{2(7) - 12}{2} = 1$$

así que el IDH para el ciclohexano es 1, y con evidencia espectroscópica o química de ausencia de enlace  $\pi$ , se llega a la conclusión de la existencia de un ciclo en la estructura molecular del ciclohexano.

La misma ecuación es aplicable a ejemplos de mayor complejidad como la ergotamina (figura 4), con fórmula molecular  $C_{33}H_{35}N_5O_5$ , se sustituyen los valores:

$$IDH = \frac{3(0) + 2(0 + 33 + 0 + 1) + 5 - (0 + 35)}{2} = \frac{38}{2} = 19$$

Al examinar su estructura (Merck, 1989) vemos que se tienen ocho anillos y 11 enlaces  $\pi$ :

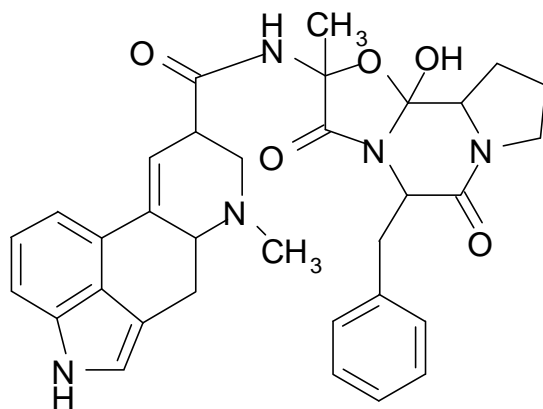


Figura 4. Ergotamina.

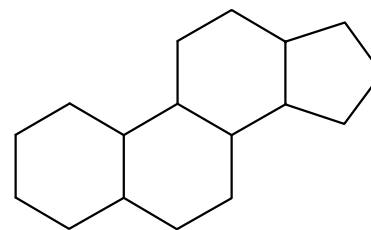


Figura 5. Ciclopentanoperhidrofenantreno.

La otra manera de utilizar el IDH, es en el recuento de hidrógenos para facilitar el cálculo de la fórmula molecular, a partir de su fórmula desarrollada. Tomando como ejemplo la estructura del ciclopentanoperhidrofenantreno (figura 5), sólo hace falta contar los átomos de carbono y el número de hidrógenos se determina aplicando la ecuación F-9, la cual por ausencia de heteroátomos se reduce a:

$$H = 2n + 2 - 2(IDH) = 2(n + 1 - IDH)$$

En este caso el IDH equivale al número de ciclos 4 y “n” al número de carbonos 17, por lo que el número de átomos de hidrógeno resulta ser:

$$H = 2(17 + 1 - 4) = 28$$

La ecuación es aplicable solamente a moléculas sin carga o sin radicales libres.

## Conclusiones

La aplicación de la ecuación desarrollada facilita a los alumnos la comprensión del cálculo de IDH tanto de moléculas sencillas como de mayor complejidad, de la misma manera se puede utilizar para efectuar el recuento de hidrógenos en las fórmulas desarrolladas, también lo pueden aplicar en el desarrollo de las estructuras químicas a partir de las fórmulas moleculares. ▀

## Referencias

- Carey, F.A. *Organic Chemistry*, 2<sup>nd</sup> ed., McGraw Hill Inc., New York, 1992, p. 242-243.
- Merck Index*, 11th. ed., Merck and Co., USA, 1989, item 3609, p. 575.
- Pellegrin, V. Molecular formulas of organic compounds: the nitrogen rule and degree of unsaturation. *J. Chem. Ed.* **60**[8], 626-633, 1983.
- Pine, S. H., Hendrickson, Cram, D. J. y Hammond. *Química Orgánica*, 4<sup>a</sup> ed., McGraw-Hill, México, 1987, p. 14-15.
- Solomons, T. W. G. *Fundamentos de Química Orgánica*, Noriega Editores, México, 1988, p. 188.
- Solomons, T. W. G. *Organic Chemistry*, John Wiley & Sons, New York, 1996, p. 296-297.