

QUÍMICA ORGÁNICA III

(QU20307)

D.C. César Rogelio Solorio Alvarado

NOMENCLATURA DE COMPUESTOS HETEROCICLOS SISTEMA HANTZSCH-WIDMAN

REGLAS:

Existen heterociclos con nombres triviales y semi-triviales reconocidos por la IUPAC. Estos se utilizan como base para construir otros nombres de compuestos policíclicos.

COMPUESTOS HETEROCÍCLIOS

MONOANULARES

1. Consultar si el sistema por NOMBRAR tiene un nombre trivial (tabla de nombres triviales al final), si no construirlo con las siguientes reglas.
2. Utilizar la siguiente secuencia para dar nombre al heterociclo en cuestión



PREFIJO: Indica la naturaleza del heteroátomo (O, S, N, P, etc).

RAIZ: Indica el tamaño del anillo (3,4,5,6 miembros etc).

SUFIJO: Indica el grado de insaturación.

3. Cada heteroátomo se indican con una terminación específica (tabla 1)

ELEMENTO	PREFIJO
Oxígeno	Oxa
Azufre	Tia
Nitrógeno	Aza
Fósforo	Fosfa
Boro	Bora
Silicio	Sila
Arsénico	Arsa

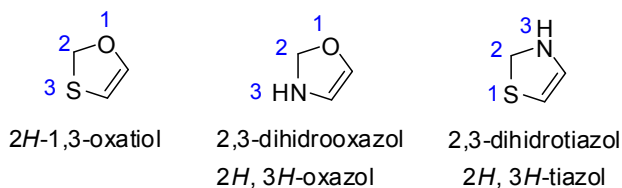
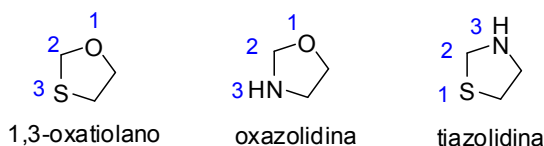
La letra "a" se elimina cuando el prefijo va seguido de una vocal

4. La multiplicidad del heteroátomo se indica con un prefijo adicional como: **di-, tri-, tera-** etc.
5. Cuando el compuesto tiene dos o más heteroátomos, al nombrarlo se sigue la prioridad a continuación descrita: **O > S > N** vg. oxatio (O,S); oxazo (O, N), tiazó (S, N).
6. La raíz (tamaño del anillo) y el sufijo (insaturación) se denotan mediante las siguientes terminaciones (Tabla 2).

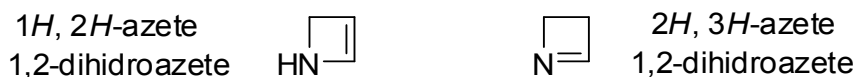
TAMAÑO DEL ANILLO	RAIZ	S U F I J O	
		ANILLO SATURADO	ANILLO INSATURADO
3	-ir-	-irano N: -iridina	-ireno N: -irina
4	-et-	-etano N: -etidina	-ete
5	-ol-	-olano N: -olidina	-ol
6	-in-	-inano O, S: -ano	-ina
7	-ep-	-epano	-epina
8	-oc-	-ocano	-ocina
9	-on-	-onano	-onina
10	-ec-	-ecano	-ecina

O= Oxa; S= Tia; N= Aza

7. Es necesario enumerar los átomos en el anillo. La numeración inicia con el heteroátomo de mayor prioridad y continúa en el anillo para dar **los números menores posibles** a los otros heteroátomos o sustituyentes.



8. Para compuestos “insaturados” que aún contengan *átomos de carbono o heteroátomos saturados*, estos se especifican de las siguientes formas:
- a) Se escribe el número que le corresponde seguido de la letra *H* (mayúscula y cursiva) para tantos átomos saturados como existan.
- b) Se escribe el número que le corresponde (separado por comas) seguido de los prefijos **di-, tri-, tera-**, etc, según la cantidad de átomos insaturados y el sufijo **hidro**.



- c) Siempre que sea posible se asigna el menor número.

COMPUESTOS HETEROCÍCLIOS POLIANULARES FUSIONADOS

IMPORTANTE: Considerar siempre los nombres triviales y semitriviales aceptados por la IUPAC tanto para sistemas mononucleares como de anillos fusionados. Este siempre es el punto de inicio al dar nombre a un sistema.

9. Cuando un sistema monocíclico no tiene nombre trivial reconocido, este se construye a partir de las reglas anteriores (1-8).
10. Los sistemas de heterociclos con anillos fusionados pueden tener cualquiera de las dos formas siguientes:

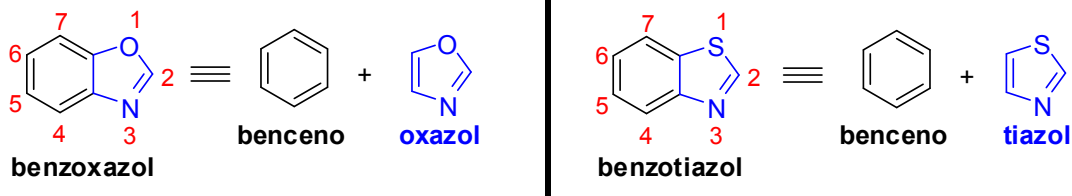
- A) CARBOCICLO-HETEROCICLO
B) HETROCICLO-HETEROCICLO



ELECCIÓN DEL HETEROANILLO BASE:

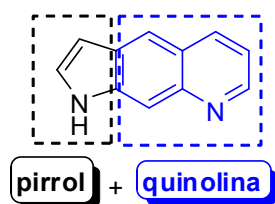
Para dar nombre al heterociclo, es necesario **IDENTIFICAR** el *heteroanillo base*, el *anillo secundario* y los sustituyentes.

11. Para sistemas de anillos fusionados, CARBOCICLO-HETEROCICLO (inciso A, regla 10) se toma el *heteroanillo como base* y se agrega como prefijo el nombre del carbociclo unido a él.

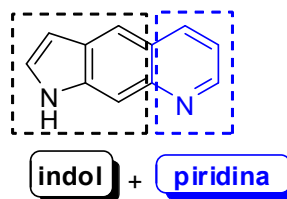


12. De los nombres triviales aceptados, se elige el sistema de mayor tamaño reconocido (v.g. indol preferente sobre pirrol; quinolina preferente a piridina etc).

CORRECTO



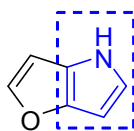
INCORRECTO



13. Para escoger el **heteroanillo base** en un sistema polianular fusionado HETEROCICLO-HETEROCICLO (inciso **B**, regla **10**), se da preferencia al heterociclo que tiene **NITRÒGENO** sobre el que tiene **OXÍGENO** sobre el que tiene **AZUFRE** ($N > O > S$). Sin embargo al nombrar el compuesto se sigue la secuencia $O > S > N$ (regla 5).

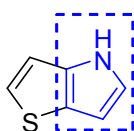
Elección heteroanillo base: $N > O > S$.

Dar nombre al sistema polianular: $O > S > N$. (Regla 5).



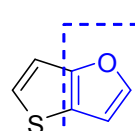
4H-furo[3,2-b]pirrol

$N > O$



4H-tieno[3,2-b]pirrol

$N > S$

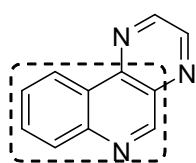


tieno[3,2-b]furano

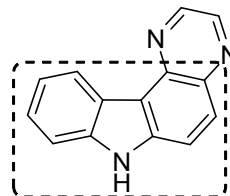
$O > S$

$N > O > S$

14. Si hay más de dos anillos presentes, se elige el componente que tiene mayor número de anillos con nombre trivial reconocido.

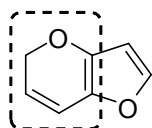


componente base
quinolina

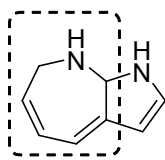


componente base
carbazol

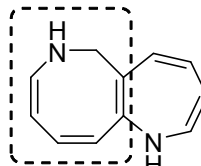
15. Si los anillos son de distinto tamaño y ambos contienen el mismo heteroátomo se escoge como sistema base el anillo el más grande.



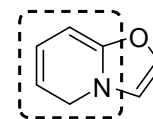
base pirano



base azepina

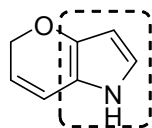


base azocina

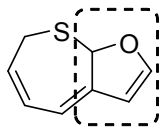


base piridina

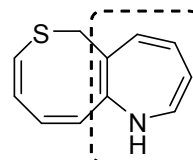
16. Si los anillos son de distinto tamaño y con heteroátomos distintos, el componente base se escoge según la regla **13** ($N > O > S$).



base pirrol

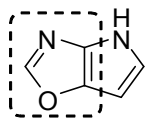


base furano

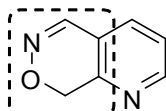


base azepina

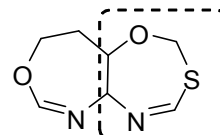
17. Si dos anillos fusionados son del mismo tamaño y tienen distinto número de heteroátomos por anillo, el anillo con más heteroátomos conforme a la regla **13** es el componente base.



base oxazol

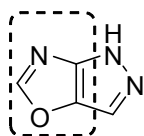


base oxazina

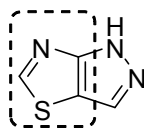


base oxatiazepina

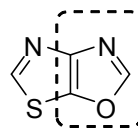
18. La **CANTIDAD** y **TIPO (diversidad)** de heteroátomos es importante. Si dos anillos fusionados del mismo tamaño tienen la misma cantidad de heteroátomos, el componente base será aquel con mayor tipo o diversidad de heteroátomos, conforme a la regla **13**.



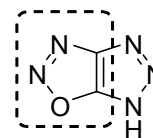
base oxazol



base tiazol

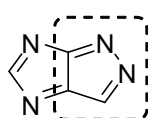


base oxazol

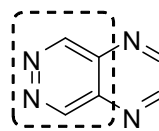


base oxadiazol

19. Si los componentes son del mismo tamaño y contienen el mismo número y tipo de heteroátomos, el componente base es el anillo en el que los heteroátomos tengan los números mas bajos antes de la fusión.

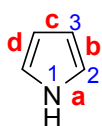


base pirazol

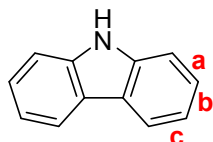


base piridazina

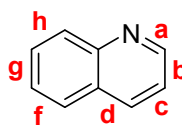
20. Los enlaces **del componente base** se designan como “caras”. La cara “a” corresponde al enlace 1,2; la cara “b” al enlace 2,3 etc.



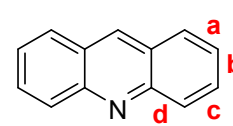
pirrol



9H-carbazol



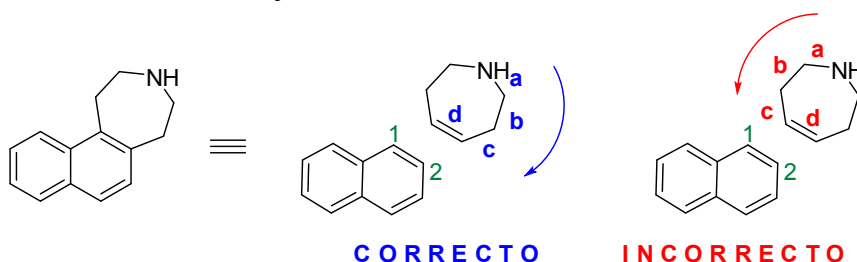
quinolina



acridina

21. Las caras siempre se designan de la “a→z” en sentido hacia el enlace de fusión. Si existen 2 formas de asignar las caras y en ambas el enlace

de fusión tiene la misma letra, se escoge aquella forma que siga el giro de las manecillas del reloj.



22. El *segundo anillo heterociclo* se agrega al nombre como **prefijo** del componente base. El prefijo se establece al sustituir la letra “a” del nombre por la letra “o”. Existen algunas excepciones (Tabla 3).

HETEROCICLO	NOMBRE COMO PREFIJO
Furano	Furo
Imidazol	Imidazo
Isoquinolina	Isoquino
Piridina	Pirido
Quinolina	Quino
Tiofeno	Tieno
Triazol	Triazolo

23. Una vez identificado el *componente base* y asignadas las caras, el segundo anillo **YA SEA CARBOCÍCLO O HETEROCICLO** se enumera de manera normal asignando siempre los números más pequeños posibles.

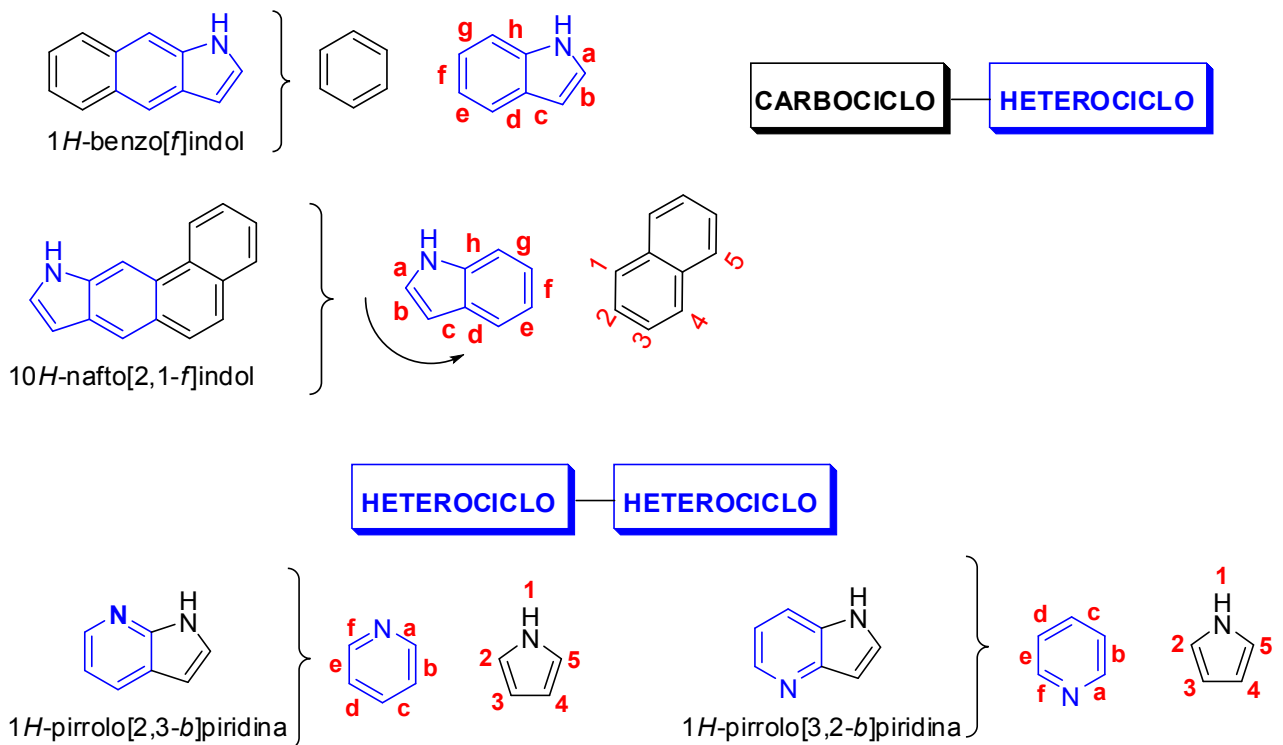
24. Se indica la fusión del sistema polianular.

LA FUSIÓN DE LOS ANILLOS (CARBOCICLO-HETEROCICLO Y HETEROCICLO-HETEROCICLO)

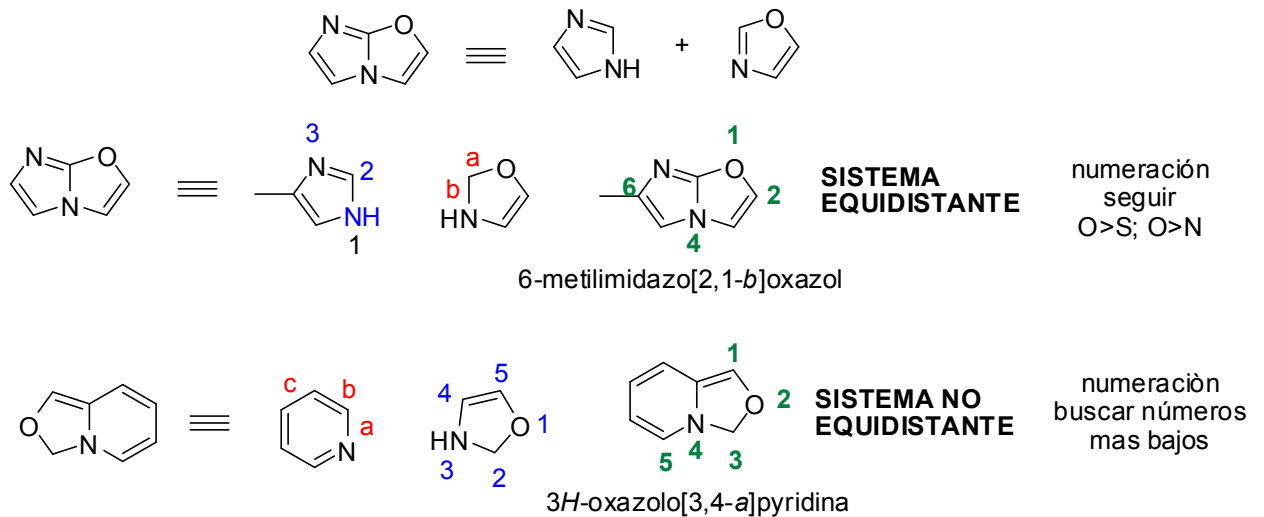
25. La **FUSIÓN** se indica entre corchetes y para indicarla:

- a) Se inicia en la(s) cara(s) del *sistema base*.
- b) Continúa con el *segundo anillo* y se anota:

[Posición 1er átomo unido, Posición 2do átomo unido – cara sistema base]



26. Si una posición de la fusión está ocupada por un heteroátomo, cada uno de los anillos contendrá al heteroátomo.

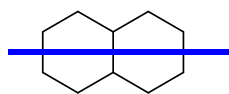


NUMERACIÓN DEL SISTEMA HETEROCICLO

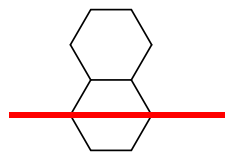
Para enumerar **CORRECTAMENTE** un sistema heterociclo hay que tener en cuenta las siguientes consideraciones:

Orientación del anillo

27. El mayor número de anillos debe encontrarse en el eje horizontal.

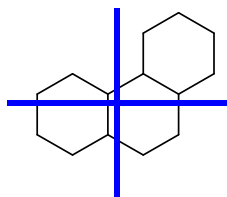


ORIENTACIÓN
CORRECTA

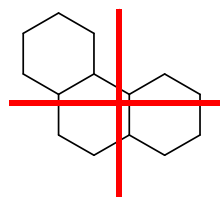


ORIENTACIÓN
INCORRECTA

28. Del resto de los anillos, la mayoría deben encontrarse en el primer cuadrante.

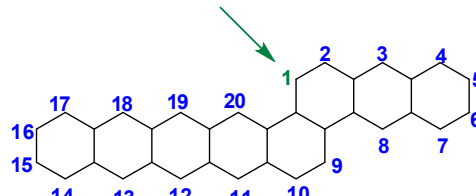
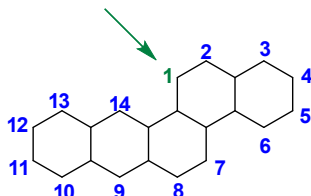
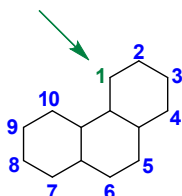


ORIENTACIÓN
CORRECTA



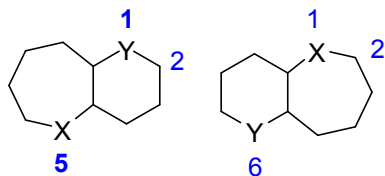
ORIENTACIÓN
INCORRECTA

29. La numeración comienza en el anillo situado en el primer cuadrante y continúa siguiendo el giro de las manecillas del reloj.

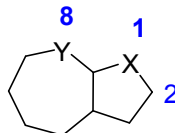


30. RESPECTO A LA POSICIÓN DE LOS HETEROÁTOMOS en los sistemas **heterociclo-heterociclo** deben considerar dos tipos de sistemas:

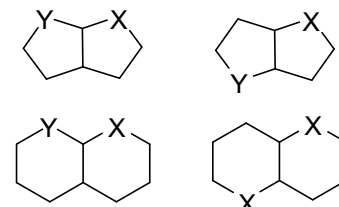
- A) NO EQUIDISTANTES
- B) EQUIDISTANTES



NO EQUIDISTANTES



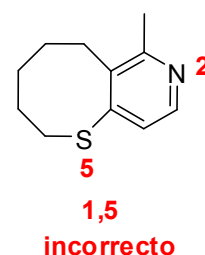
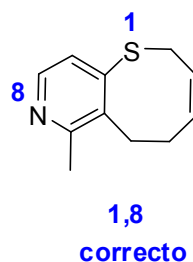
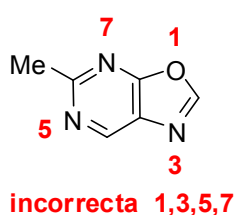
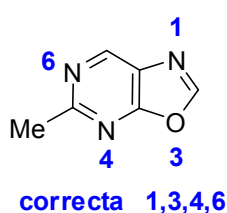
EQUIDISTANTES



etc

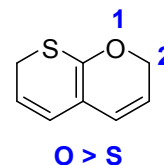
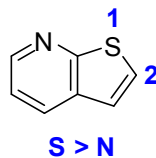
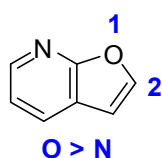
EQUIDISTANTES

31. La **orientación en los sistemas NO EQUIDISTANTES** debe ser tal que los heteroátomos tengan entre sí la menor numeración, **iniciando siempre que sea posible el número 1 con un heteroátomo** y en el primer cuadrante.



32. En los sistemas **EQUIDISTANTES** encontramos a su vez dos clases de sistemas:

A) SISTEMAS EQUIDISTANTES NO, NS y OS. La numeración inicia en el anillo según la regla de elección de prioridad **O>S>N**.

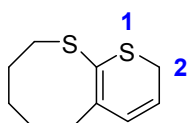
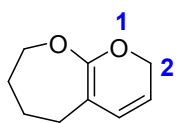
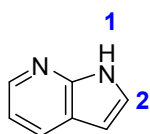


furo[2,3-*b*]piridina tieno[2,3-*b*]piridina 2*H*, 7*H*-tiopirano[2,3-*b*]pirano

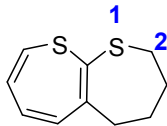
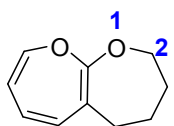
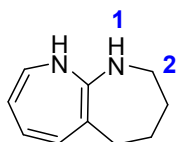
Ojo: anillo base se escoge siempre N>O>S

B) SISTEMAS EQUIDISTANTES NN, SS Y OO. En este caso la numeración inicia en:

1. El anillo más pequeño **SI SON DE DIFERENTE TAMAÑO**.
2. El anillo más saturado **SI SON DE IGUAL TAMAÑO**.



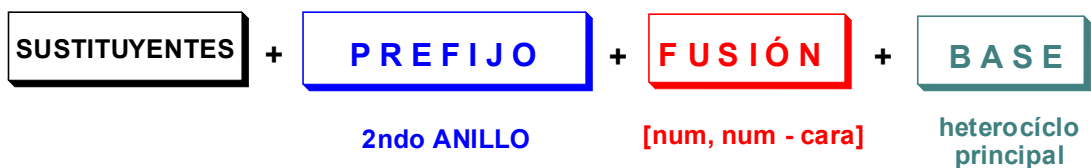
DIFERENTE TAMAÑO
numeración inicia en anillo
MAS PEQUEÑO.



MISMO TAMAÑO
numeración inicia en anillo
MAS SATURADO.

3. El anillo base es el más saturado.

33. Para dar nombre al compuesto heeterociclo se sigue el siguiente esquema:



HETEROCICLOS CON NOMBRES TRIVIALES RECONOCIDOS POR LA IUPAC

