

NOMENCLATURA DE COMPUESTOS HETEROCICLOS SISTEMA HANTZSCH-WIDMAN

QUÍMICA ORGÁNICA III (QU20307)

D.C. César Rogelio Solorio Alvarado

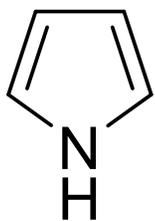
Reglas

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

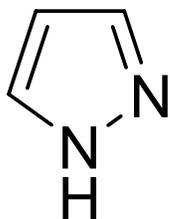
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS MONOANULARES

Regla 1

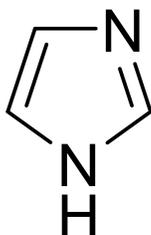
Verificar si el sistema por NOMBRAR tiene un nombre trivial (tabla de nombres triviales al final), si no construirlo con las siguientes reglas



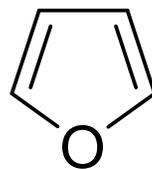
pirrol



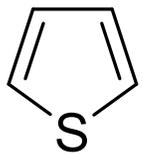
pirazol



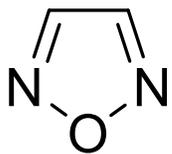
imidazol



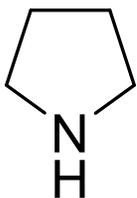
furano



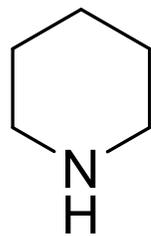
tiofeno



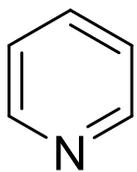
furazano



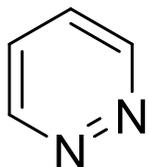
pirrolidina



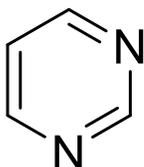
piperidina



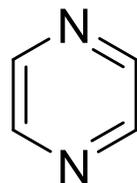
piridina



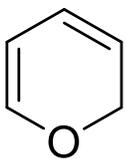
piridazina



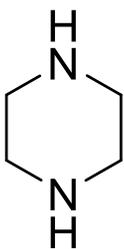
pirimidina



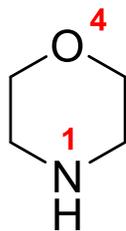
pirazina



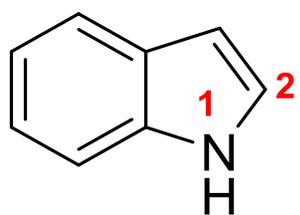
pirano



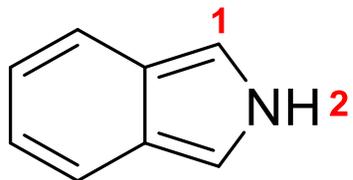
piperazina



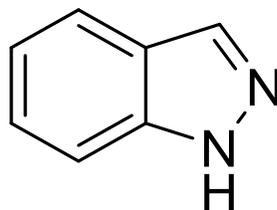
morfolina



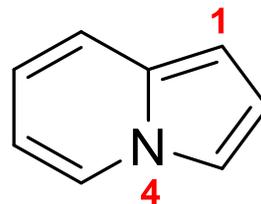
indol



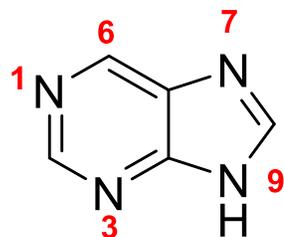
isoindol



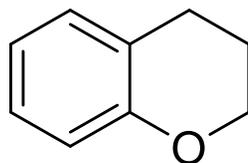
indazol



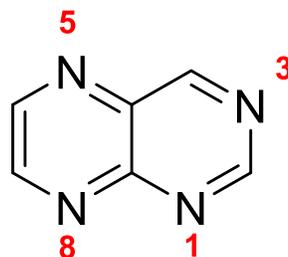
indazolina



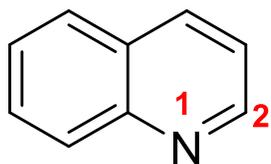
purina



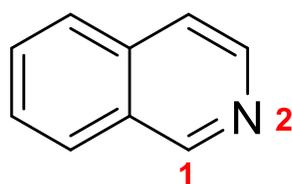
cromano



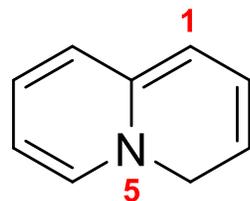
pteridina



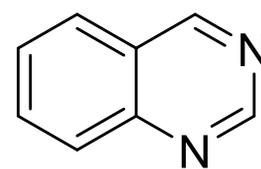
quinolina



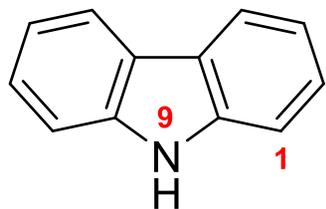
isoquinolina



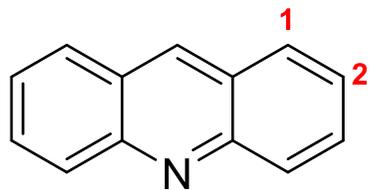
quinolizina



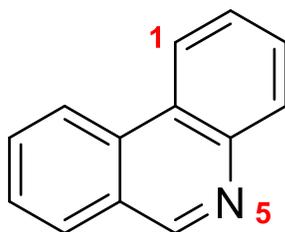
quinazolina



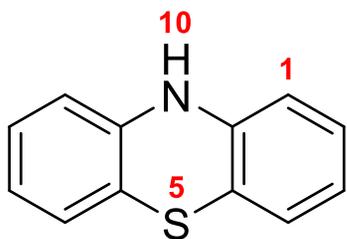
carbazol



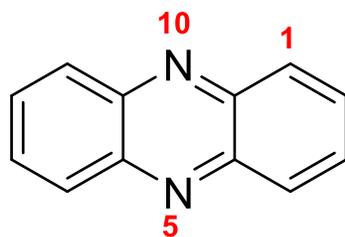
acridina



fenantidrina



fenotiazina



fenazina

Regla 2

Utilizar la siguiente secuencia para dar nombre al heterociclo en cuestión



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

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

PREFIJO: Indica el grado de insaturación.

Regla 3

Para 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

Regla 4

La multiplicidad del heteroátomo se indica con un prefijo adicional como: **di-**, **tri-**, **tera-** etc.

Regla 5

Quando el compuesto tiene dos o más heteroátomos, al nombrarlo se sigue la prioridad a continuación descrita: $O > S > N$.
... oxatio (O,S); oxazo (O, N), tiazio (S, N).

Regla 6

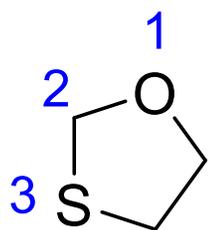
raíz (tamaño del anillo) y el sufijo (insaturación) se denotan mediante las siguientes terminaciones (Tabla 2).

TAMANO DEL ANILLO	RAIZ	SUFIJO	
		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

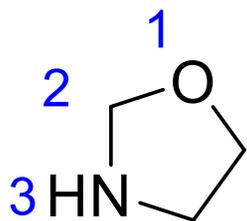
O= Oxa; S= Tia; N= Aza

Regla 7

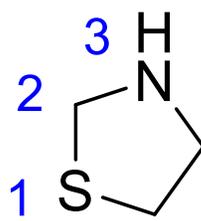
Es necesario enumerar los átomos en el anillo. La numeración inicia con el heteroátomo de mayor prioridad y continúa en el anillo para dar los números menores posibles a los otros heteroátomos o sustituyentes.



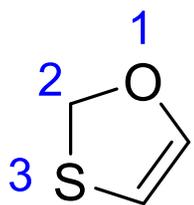
1,3-oxatiolano



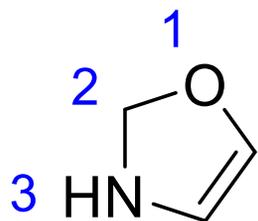
oxazolidina



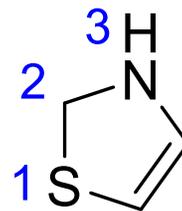
tiazolidina



2H-1,3-oxatiol



2,3-dihidrooxazol
2H, 3H-oxazol



2,3-dihidrotiazol
2H, 3H-tiazol

Regla 8

Para compuestos “insaturados” que aún contengan *átomos de carbono o heteroátomos saturados*, estos se especifican de las siguientes formas:

1. escribe el número que le corresponde seguido de la letra *H* (mayúscula y cursiva) para tantos átomos saturados como existan.

2. escribe el número que le corresponde (separado por comas) seguido de los prefijos *di-*, *tri-*, *terta-*, etc, según la cantidad de átomos insaturados y el prefijo *hidro*.

1*H*, 2*H*-azete
1,2-dihidroazete



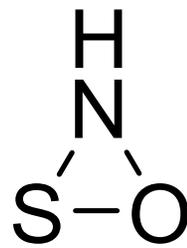
2*H*, 3*H*-azete
1,2-dihidroazete

Siempre que sea posible se asigna el menor número.

dine



1,2-oxaziridine

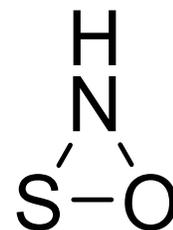


1,2,3-oxathiaziridine

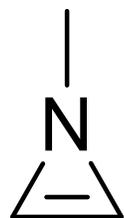
irine



1,2-oxazirene



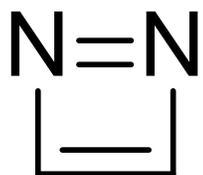
1,2,3-oxathiaziridine



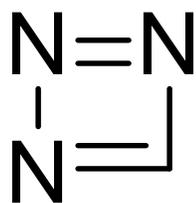
1-methyl-1H-azirine



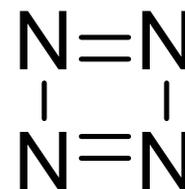
ete



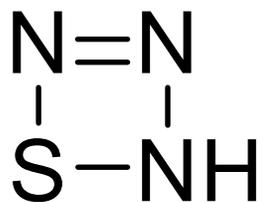
1,2-diazete



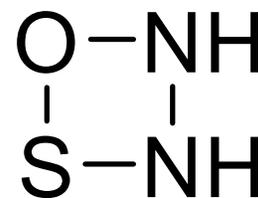
triazete



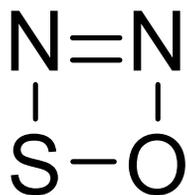
tetrazete



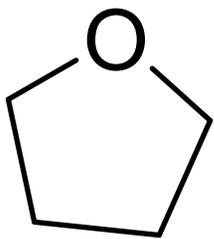
1,2,3,4-thiatriazete



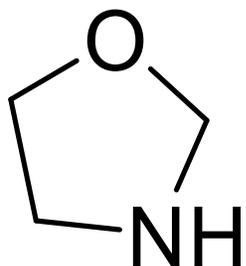
1,2,3,4-oxathiadiazetidene



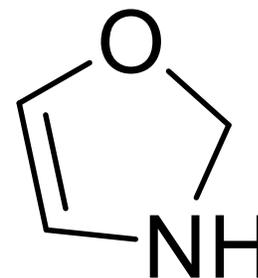
oxathiadiazete



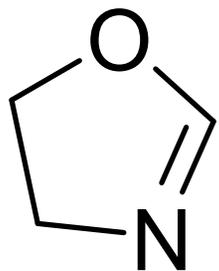
tetrahydrofuran
olano



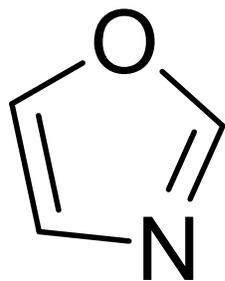
oxazolidine



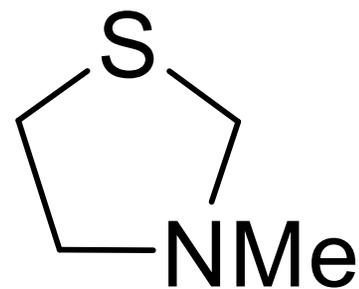
2,3-dihydrooxazole



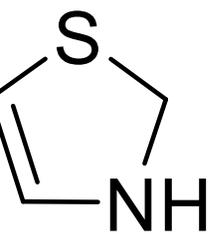
2,3-dihydrooxazole



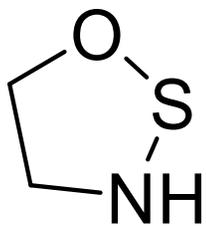
oxazole



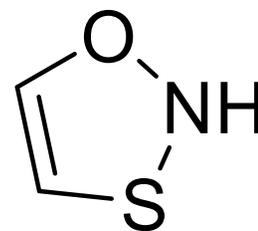
3-methylthiazolidine



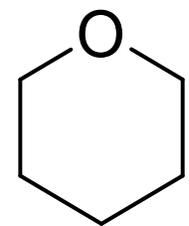
hydrothiazole



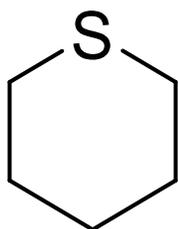
1,2,3-oxathiazolidine



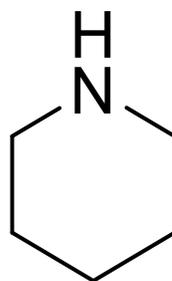
1,3,2-oxathiazole
2h-1,3,2-oxatiazolo



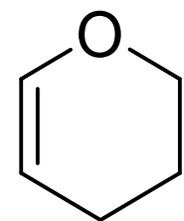
pirano
oxolano



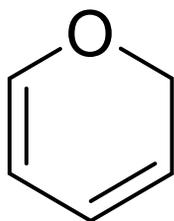
Tiopirano
tiinano



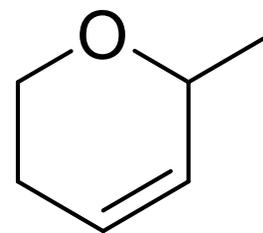
piperidine



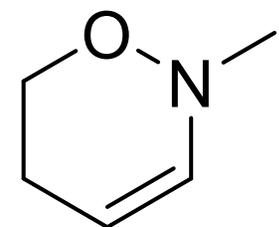
2,3,6-trihidro-pirano



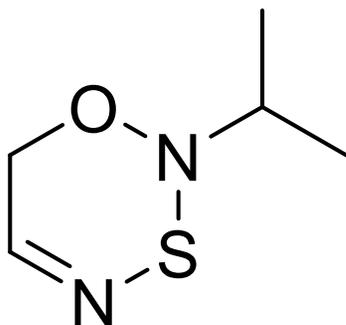
2-hidro-pirano



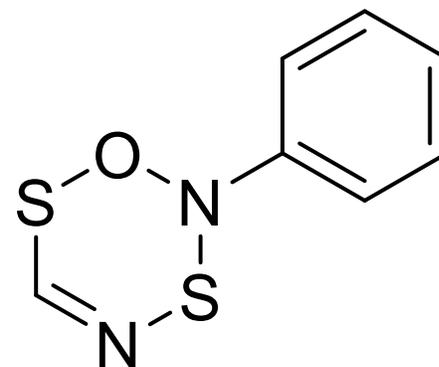
6-metil-2H,3H,6H-
trihidro-pirano



2-metil-2H,5H,6H-
trihidro-1,2-oxazina



2-isopropil-2H,6H-
dihidro-1,3,2,4-
oxatiadiazina



6-fenil-1,2,5,4,6-
oxaditiadiazina

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.

Regla 9

Quando un sistema monocíclico no tiene nombre trivial reconocido, este se construye a partir de las reglas anteriores (1-8).

Regla 10

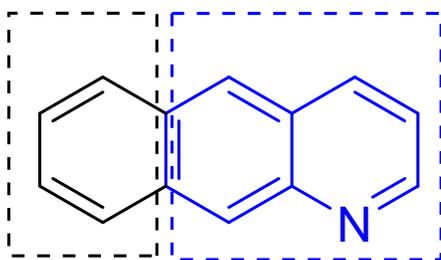
Los sistemas de heterociclos con anillos fusionados pueden tener cualquiera de las dos formas siguientes:

A) CARBOCICLO-HETEROCICLO

B) HETEROCICLO-HETEROCICLO

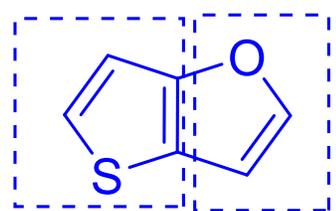
carbociclo — heterociclo

heterociclo — heterociclo



carbociclo heterociclo

B)



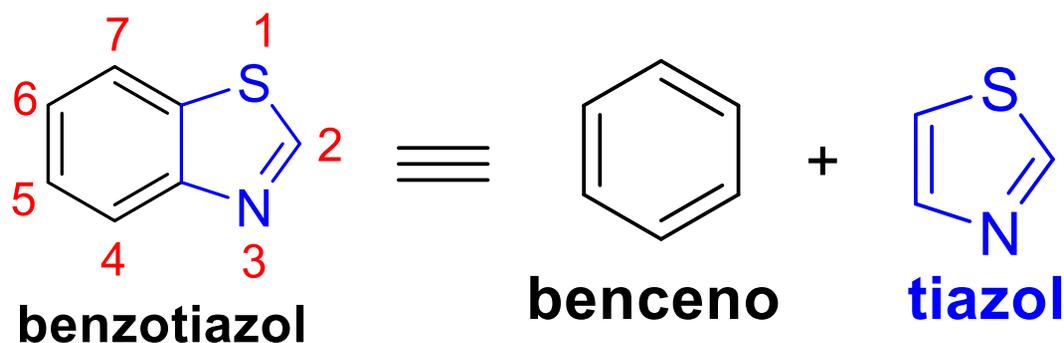
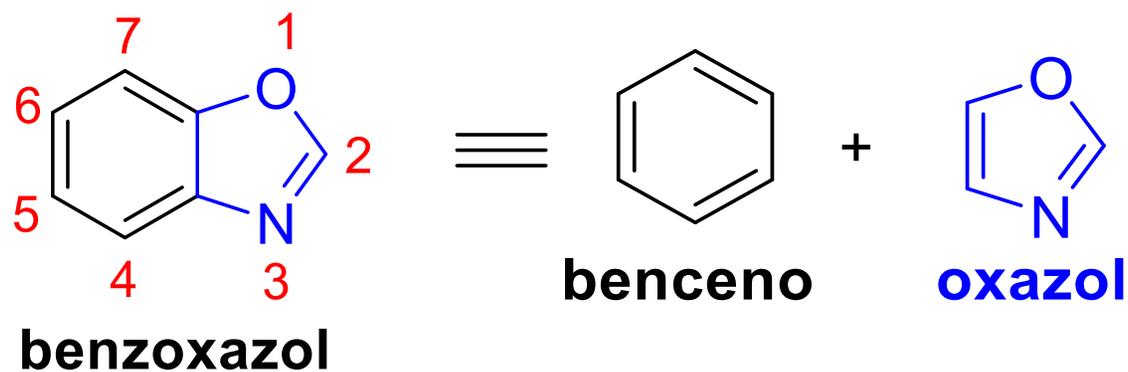
heterociclo heterociclo

ELECCIÓN DEL HETEROANILLO BASE:

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

Regla 11

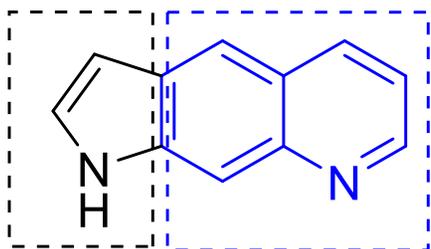
Para sistemas de anillos fusionados, CARBOCILCO-HETEROCICLO (caso A, regla 10) se toma el heteroanillo como *base* y se agrega como prefijo el nombre del carbociclo unido a él.



Regla 12

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

CORRECTO

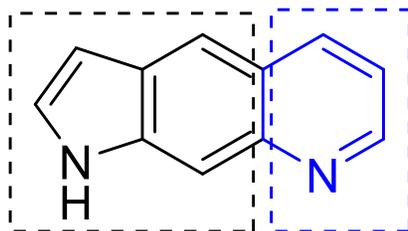


pirrol

+

quinolina

INCORRECTO



indol

+

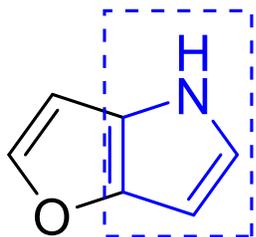
piridina

Regla 13

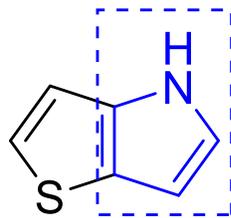
escoger el *heteroanillo base* en un sistema polianular nombrado HETEROCICLO-HETEROCICLO (inciso B, regla 10), se da preferencia al heterociclo que tiene **NITRÓGENO** sobre el que tiene **OXÍGENO** sobre el que tiene **AZUFRE** ($N > O > S$). Sin embargo al nombrar el compuesto se sigue la secuencia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

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

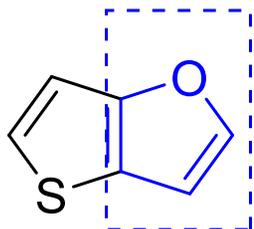
Dar nombre al sistema polianular: $O > S > N$. (Regla 5).



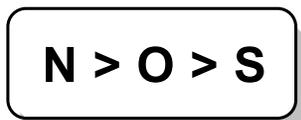
4*H*-furo[3,2-*b*]pirrol



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

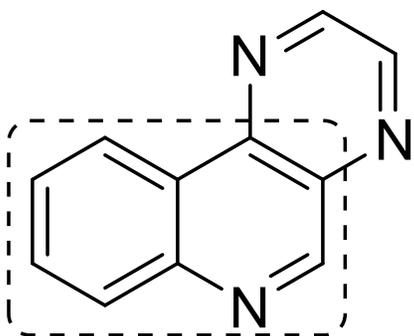


tieno[3,2-*b*]furano

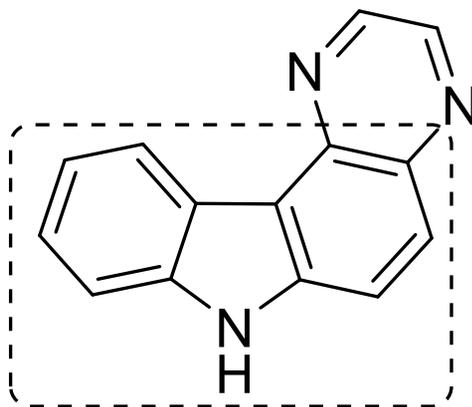


Regla 14

Y más de dos anillos presentes, se elige el componente que mayor número de anillos con nombre trivial reconocido.



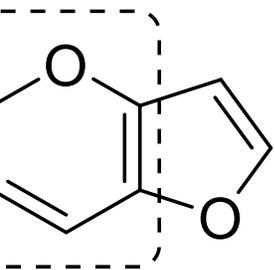
**componente base
quinolina**



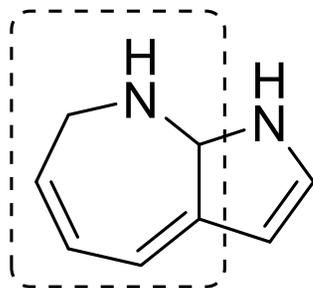
**componente base
carbazol**

Regla 15

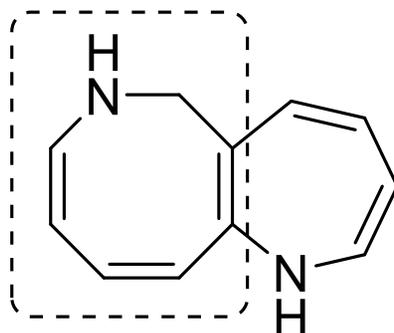
Si los anillos son de distinto tamaño y ambos contienen el mismo número de átomos se escoge como sistema base el anillo el más grande.



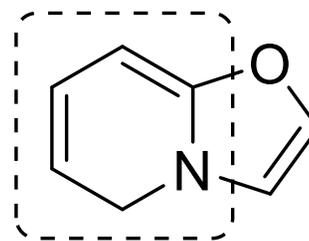
base pirano



base azepina



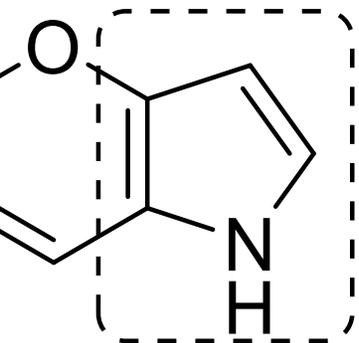
base azocina



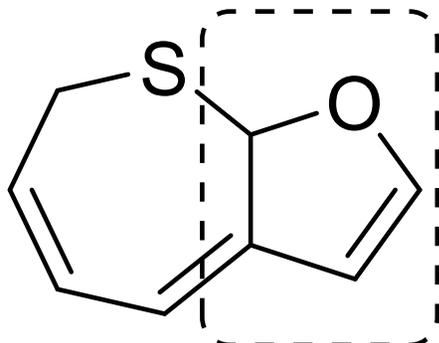
base piridina

Regla 16

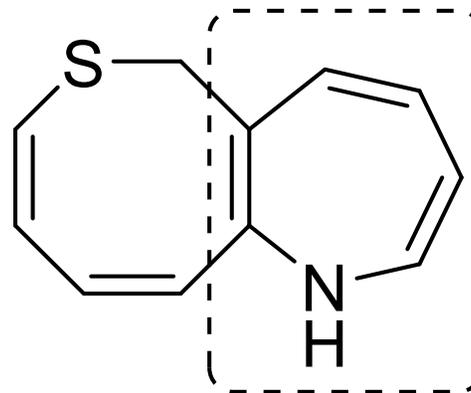
Los anillos son de distinto tamaño y con heteroátomos distintos, el componente base se escoge según la regla 13 ($N > O > S$).



base pirrol



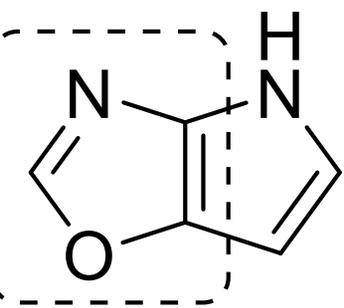
base furano



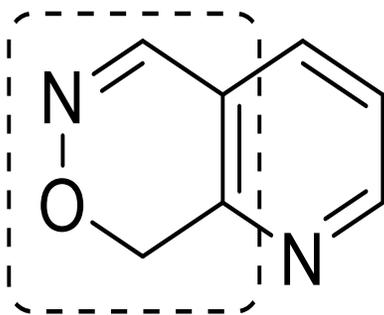
base azepina

Regla 17

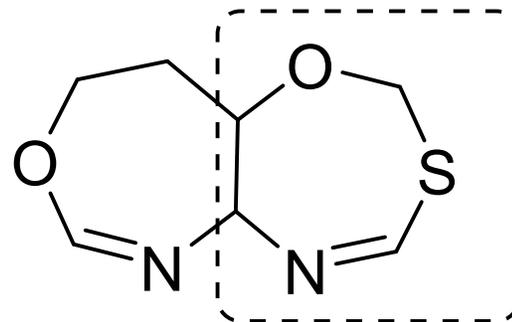
Los anillos fusionados son del mismo tamaño y tienen distinto número de heteroátomos por anillo, el anillo con más heteroátomos conforme a la regla 13 es el componente base.



base oxazol



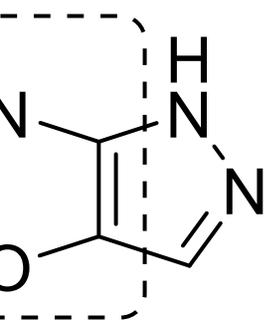
base oxazina



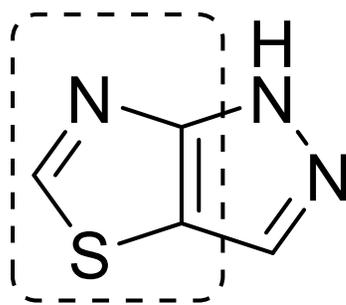
base oxatiazepina

Regla 18

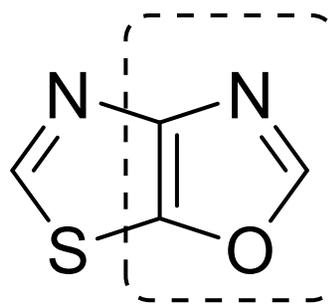
CANTIDAD y TIPO (diversidad) de heteroátomos es importante. Los anillos fusionados del mismo tamaño tienen la misma cantidad de heteroátomos, el componente base será aquel con mayor tipo o diversidad de heteroátomos, conforme a la regla 13.



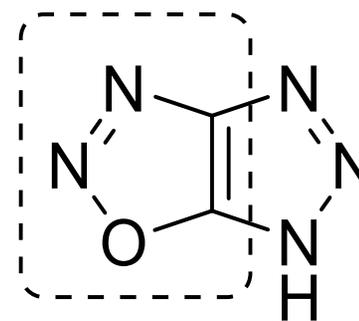
base oxazol



base tiazol



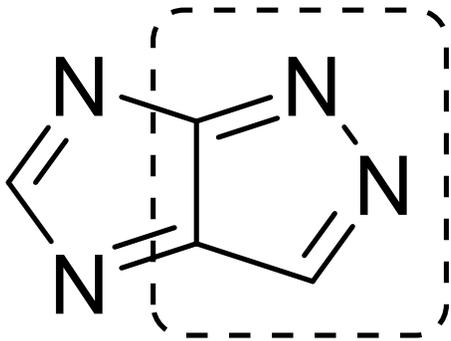
base oxazol



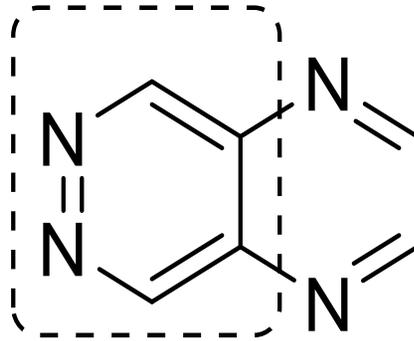
base oxadiazol

Regla 19

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 más bajos antes de la nomenclatura.



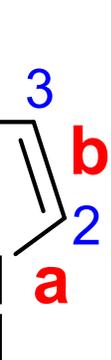
base pirazol



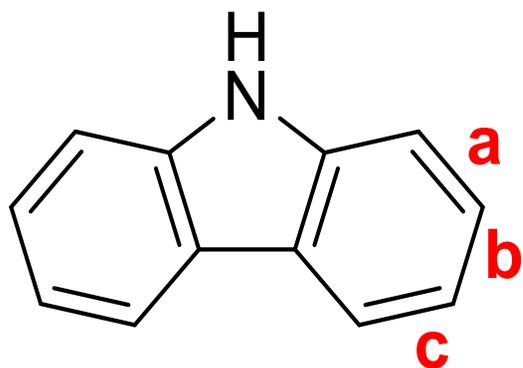
base piridazina

Regla 20

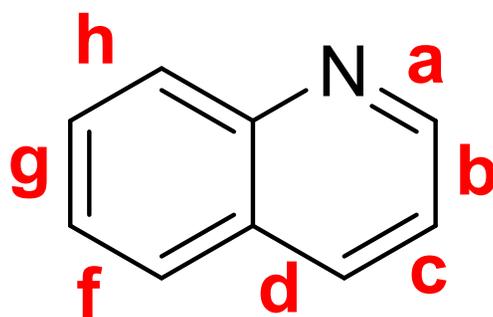
Enlaces *del componente base* se designan como “caras”. La “a” corresponde al enlace 1,2; la cara “b” al enlace 2,3 etc.



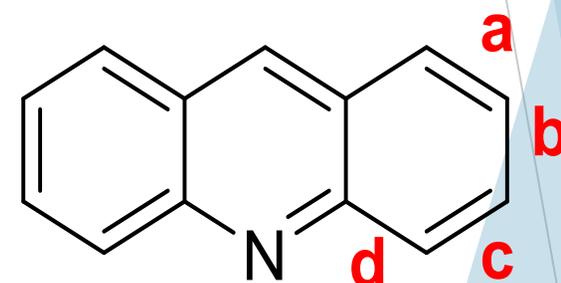
rol



9H-carbazol



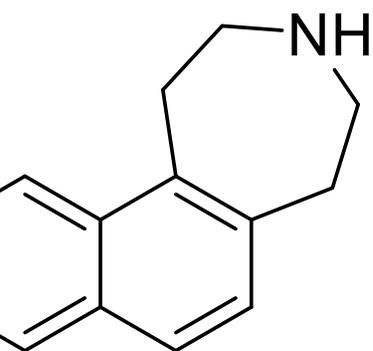
quinolina



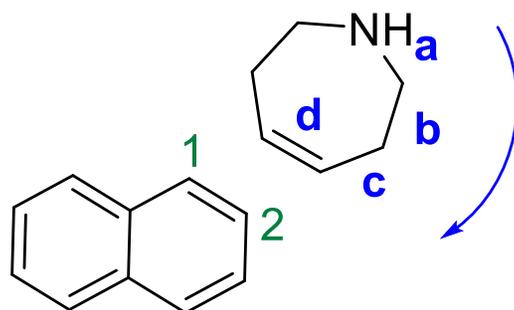
acridina

Regla 21

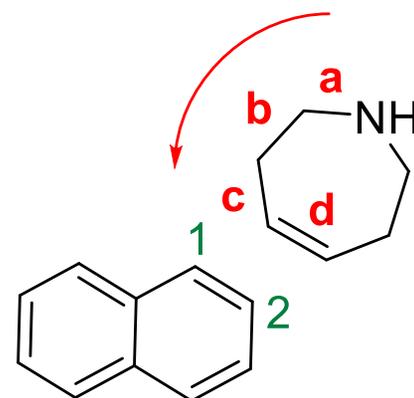
Las caras siempre se designan de la “a→z” en sentido hacia el enlace de fusión. Si existen 2 formas de asignar las caras y en ambas el enlace de fusión tiene la misma letra, se escoge aquella que siga el giro de las manecillas del reloj.



≡



CORRECTO



INCORRECTO

Regla 22

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).

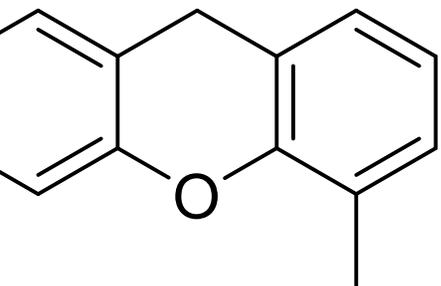
HETEROCICLO	NOMBRE COMO PREFIJO
Furano	Furo
Imidazol	Imidazo
Isoquinolina	Isoquino
Piridina	Pirido
Quinolina	Quino
Tiofeno	Tieno
Triazol	Triazolo

Regla 23

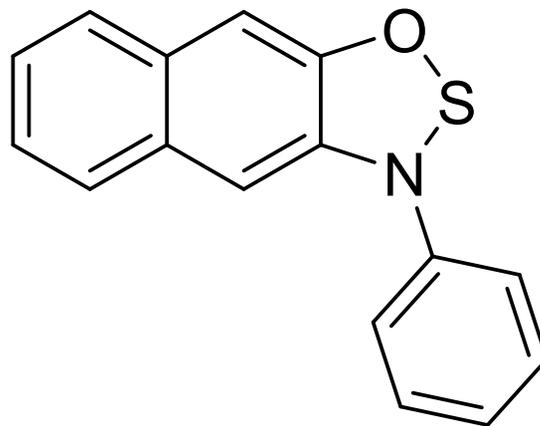
Una vez identificado *el componente base* y *asignadas las caras*, el segundo anillo **YA SEA CARBOCÍCLO O HETEROCÍCLO** se enumera de manera normal asignando siempre los números más pequeños posibles.

Regla 24

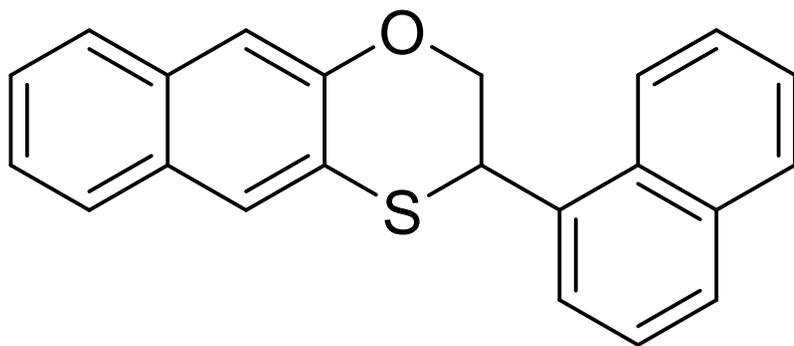
indica la fusión del sistema
liangular.



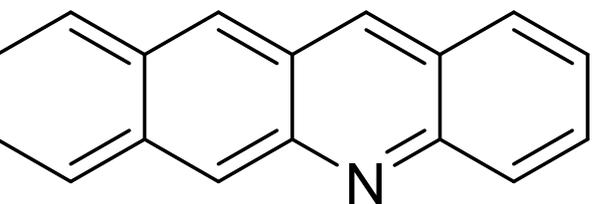
1-ethyl-10H-
benzo[b,e]pyran



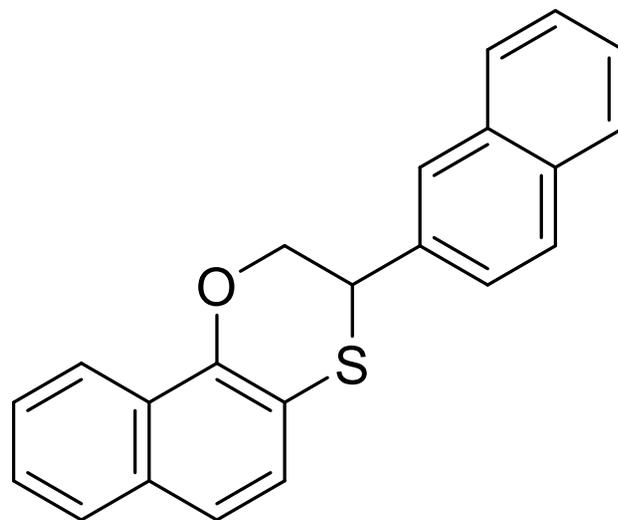
3-fenil-3H-nafto[2,3-d][1,2,3]oxatiazol



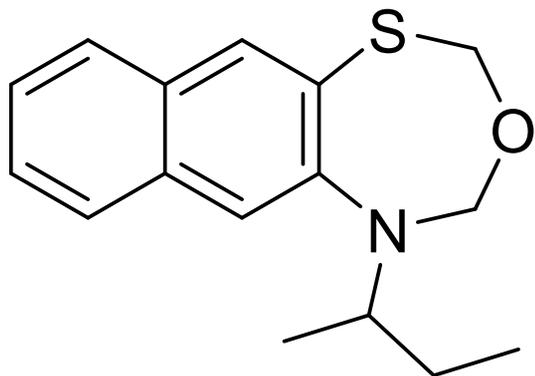
3-(1naftil)-2H,3H-nafto[2,3-b][1,4]oxatiina



Antho[2,3-b]acridine



3-(2-naftil)-2H,3H-nafto[1,2][1,4]oxatiina



1-ethyl-2-isobutyl-2H,4H,5H-nafto[2,3-d][1,3,6]oxatiazepina ³⁹