

26
2oj.



Universidad Nacional Autónoma
de México



Facultad de Estudios Superiores
CUAUTITLÁN

Recurso Tutorial para el Aprendizaje de Nomenclatura en Química Heterocíclica

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
QUIMICA FARMACEUTICA BIOLOGA
P R E S E N T A

LEONOR HERRERA RODRIGUEZ

DIRECTOR DE TESIS

M. en C. René Miranda Ruvalcaba

ASESOR DE TESIS

Q. José Guillermo Penieres Carrillo



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

| | |
|--|----|
| I. PROLOGO | 1 |
| II. INTRODUCCION | 2 |
| III. METODO EXTENDIDO DE HANTZSCH-WIDMAN | 5 |
| IV. METODO DE LA IUPAC PARA SISTEMAS POLICICLICOS | 22 |
| V. METODO DEL CHEMICAL ABSTRACTS Y METODO DE STELZNER (NOMENCLATURA DE REPLAZO) | 32 |
| VI. NOMENCLATURA TRIVIAL | 35 |
| VII. EJERCICIOS | 40 |
| VIII. CONCLUSIONES | 57 |
| IX. BIBLIOGRAFIA | 58 |

PROLOGO

Desde hace prácticamente una década, hemos tenido la fortuna de impartir de manera ininterrumpida, los cursos de Química Heterocíclica en la Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán de la UNAM. Igualmente, hemos podido convivir con otras Instituciones del interior de la República Mexicana, mediante invitaciones para impartir este mismo curso dentro de sus programas de Superación del Personal Académico.

A lo largo de todo este tiempo, hemos podido constatar la problemática que implica, la enseñanza de la Nomenclatura en Química Heterocíclica, en parte, por que no existe en la actualidad una uniformidad al respecto en el idioma Español, así mismo por la gran diversidad de sistemas que proporciona la literatura y, finalmente a pesar de que ya se han establecido ciertos patrones, continuamente suelen reportarse nuevas modificaciones a estas reglas.

Es así que esta modesta pero bien intencionada obra, es el producto del trabajo en nomenclatura recopilada a través de los años en las diversas ocasiones en que hemos impartido el curso de Química Heterocíclica. Sentimos muy particularmente que un material didáctico tutorial, como el aquí propuesto, será de amplia utilidad ya que hará más objetivo y en consecuencia agilizará y simplificará el trabajo clase y extraclasses al respecto.

Rene Miranda Ruvalcaba.

Jose Guillermo Penieres C.

Leonor Herrera Rodríguez.

INTRODUCCION

INTRODUCCION

La nomenclatura en Química, por definición, puede entenderse como el sustituto verbal, ortográfico y escrito de una fórmula gráfica y, en su forma más elaborada, provee la misma información estructural y espacial. Es decir, que el número de átomos contenido en el nombre y, si es el caso, su disposición tridimensional, debe de ser exactamente igual al número, y situación en el espacio, de los átomos del compuesto.

Hasta la fecha se han realizado esfuerzos, en forma organizada, para lograr la sistematización de la nomenclatura: Reglas de Génova (1892), Reglas de la International Union of Chemistry (1930) y Reglas de la IUPAC (1957), principalmente. Con respecto a sistemas heterocíclicos, uno de los principales logros fue establecido por Hantzsch y Widman (1887-1888).

El Sistema Ampliado de Hantzsch-Widman contempla el empleo de una serie de prefijos (tipo de heteroátomos presentes), y de sufijos (tamaño del anillo, grado de insaturación y presencia o ausencia de nitrógeno), siendo este de los más empleados en el campo de la química.

En el área de la Química Orgánica, en 1960 se reportó el artículo "Definitive Rules for Nomenclature of Organic Chemistry, Sec. A: Hydrocarbons; Sec. B: Heterocyclic Systems", en el *J. Am. Chem. Soc.*, (1960), 82, 5517., reglas que, con el tiempo, han sido sometidas a una serie de revisiones y modificaciones, así como de nuevas sugerencias para su aprobación. La intención primordial de estas reglas es la de ser usadas en la literatura química, ofreciendo frecuentemente diferentes alternativas para dar nombre correcto a un compuesto orgánico. Los sistemas heterocíclicos fundamentales son tratados en la Sección B de este artículo.

Otro de los avances importantes logrados en este sentido, es el desarrollado por el *Chemical Abstracts*, este método ha sido diseñado con la intención de dar un solo nombre de Índice, preferido e inambiguo, para cada compuesto. Así la nomenclatura de sistemas heterocíclicos es tratada en los apartados 119-131 en el C.A.

Considerando una relación íntima entre los dos sistemas, se observa que en la actualidad existen pocas diferencias, ya que ambos se fundamentan en el empleo del Sistema Ampliado de Hantzsch-Widman, el de la Nomenclatura de Reemplazo o Nomenclatura "A", así como en el uso de nombres triviales.

Un concepto importante dentro de la nomenclatura de compuestos orgánicos, ha sido, y es, el empleo de nombres triviales. En términos generales, los nombres triviales dan poca o ninguna información estructural, sin embargo son ampliamente usados en la literatura química. De hecho, algunos nombres sistemáticos están basados, en alto grado, en estos nombres, ya que tanto el sistema de la IUPAC como el del *Chemical Abstracts* hacen uso de ellos, aunque este último está interesado en eliminar su vocabulario trivial. Así, solamente se usan nombres triviales aceptados internacionalmente, además de que la introducción de nuevos nombres triviales, raramente se justifica en nuestros días.

De esta manera, se hace patente la realidad de que ningún sistema de nomenclatura, en forma íntegra, puede llegar a desarrollarse o a ser aceptado como único y universal. Lo que se llega a visualizar, es que el futuro apunta hacia una mayor sistematización y una gradual desaparición de muchos nombres triviales.

En resumen, la nomenclatura de sistemas heterocíclicos, actualmente, puede ser tratada por tres principales métodos:

a) Nomenclatura Trivial

b) Sistema Ampliado de Hantzsch-Widman (para sistemas monocíclicos de 3 a 10 miembros), y

c) Nomenclatura de Reemplazo.

Sin embargo, ya que las reglas establecidas están dadas en idioma inglés, cuando se trata de asignar el nombre de compuestos en forma literal al idioma español, resultan, en ocasiones, algunas incoherencias gramaticales por lo que es necesario adaptar, principalmente las terminaciones a una forma coloquial de nuestro idioma. El presente trabajo tiene como propósito el de exponer, de manera tutorial, las reglas establecidas por los diferentes sistemas, en el idioma español.

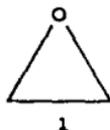
CONTENIDO



ENTIDADES HETEROCICLICAS MONOANULARES

(Sistema de Hantzsch-Widman)

Para dar nombre a las entidades heterociclicas monoanulares, con base en el Sistema de Hantzsch-Widman, se utiliza la combinación apropiada: un prefijo que hace alusión al tipo de heteroátomo presente (Tabla 1), y un sufijo que nos indica tanto el tamaño del anillo como la presencia o ausencia de nitrógeno y el grado de saturación del mismo (Tablas 2a y 2b). Para fusionar las raíces se omite la última vocal del prefijo. (Ejemplos 1-7).



1) Selección del prefijo adecuado al heteroátomo (oxígeno) presente:

OXA

2) Selección del sufijo de acuerdo con :

Tamaño del anillo.

Presencia o ausencia de nitrógeno

Grado de saturación

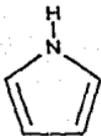
IRANO

3) Fusión de las raíces y omisión de la última vocal del prefijo:

OX~~A~~ + IRANO

4) Nombre del compuesto:

OXIRANO



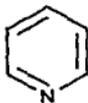
2

1) AZA

2) OL

3) AZA + OL

4) AZOL



3

1) AZA

2) INA

3) AZA + INA

4) AZINA



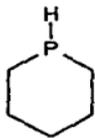
4

1) OXA

2) OL

3) OXA + OL

4) OXOL



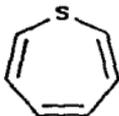
5

1) FOSFA

2) ANO

3) FOSFA + ANO

4) FOSFANO



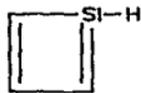
6

1) TIA

2) EPINA

3) TIA + EPINA

4) TIEPINA



7

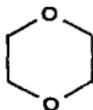
1) SILA

2) ETANO

3) SILA + ETANO

4) SILETANO

1). Cuando dos o más heteroátomos de un mismo elemento están presentes en una entidad heterocíclica, es necesario indicarlos mediante la adición de un prefijo apropiado ('di', 'tri', 'tetra', etc.), seguido del nombre correspondiente de dicha entidad. La numeración del anillo se inicia con uno de los heteroátomos y prosigue de tal forma que a los otros les corresponda la menor numeración posible (Ejemplos 8-14).



8

1.- Multiplicidad del Heteroátomo:

DIOXA

2.- Tamaño y saturación del ciclo:

ANO

3.- Fusión y omisión de la última vocal del prefijo:

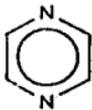
DIOXA + ANO

4.- Posición de los heteroátomos en el anillo:

1,4

5.- Nombre del compuesto:

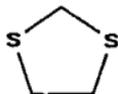
1,4-DIOXANO



2

1. DIAZA 2. INA 3. DIAZA + INA 4. 1,4

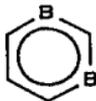
5. 1,4-DIAZINA



10

1. DITIA 2. OLANO 3. DITIA + OLANO 4. 1,3

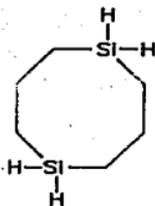
5. 1,3-DITIOLANO



11

1. DIBORA 2. INA 3. DIBORA + INA 4. 1,3

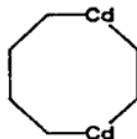
5. 1,3-DIBORINA



12

1. DISILA 2. OCANO 3. DISILA + OCANO 4. 1,5

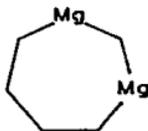
5. 1,5-DISILOCANO



13

1. DICADMA 2. OCANO 3. DICADMA + OCANO 4. 1,4

5. 1,4-DICADMOCCANO

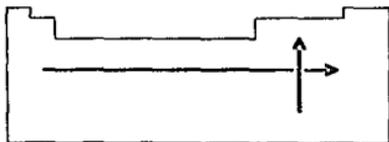


14

1. DIMAGNESA 2. EPANO 3. DIMAGNESA + EPANO 4. 1,3

5. 1,3-DIMAGNESEVANO

II) Cuando dos o más heteroátomos diferentes están presentes en el mismo ciclo, se establece un orden de prioridad para nombrar el prefijo correspondiente. La prioridad de los heteroátomos se establece de acuerdo con la posición que guardan éstos en la Tabla Periódica (Esquema 1), tiene prioridad cualquier elemento del lado derecho de la tabla periódica, independiente del período; para el caso de elementos de una misma familia la preferencia viene dada de abajo hacia arriba.



ESQUEMA 1

Finalmente la numeración del anillo comienza con el heteroátomo de mayor prioridad y prosigue alrededor del anillo para dar los números menores posibles a los otros heteroátomos o sustituyentes (Ejemplos 15-18).



15

1.- Heteroátomos presentes y orden de prioridad:

OXA y AZA

2.- Tamaño y saturación del anillo:

OL

3.- Fusión y omisión de la última vocal del prefijo:

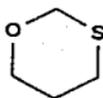
OXA + AZA + OL

4.- Posición de los heteroátomos en el anillo:

1,3

5.- Nombre del compuesto:

1,3-OXAZOL



16

1. OXA y TIA 2. ANO 3. OXA + TIA + ANO 4. 1,3

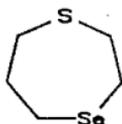
5. 1,3-OXATIANO



17

1. AZA y FOSFA 2. ETO 3. AZA + FOSFA + ETO 4. 1,3

5. 1,3-AZAFOSFETO



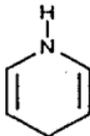
18

1. TIA y SELENA 2. EPANO 3. TIA + SELENA + EPANO 4. 1,4

5. 1,4-TIASELENEPANO

III) En ciertos casos, se presentan sistemas heterocíclicos que tienen la peculiaridad de estar parcialmente insaturados y como la Tabla 2a. no hace alusión alguna al respecto, entonces se recomienda el uso de un prefijo ('dihidro', 'tetrahidro', 'perhidro', etc.) así, se considera a estos compuestos como derivados de las entidades totalmente insaturadas; indicando, con números arábigos, las posiciones saturadas.

Por analogía, se pueden utilizar otros prefijos ('didehidro', 'tetraidehidro', ...etc.), pero recurriendo al nombre del compuesto en su máximo grado de saturación. Sin embargo la literatura recomienda preferentemente el uso de los sustratos insaturados (Ejemplos 19-25).



19

1a.- Sistema insaturado:

AZINA

2a.- Ausencia de una o dos dobles ligaduras:

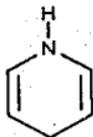
DIHIDRO

3a.- Posiciones:

1,4

4a.- Nombre del compuesto:

1,4- DIHIDROAZINA



20

1b.- Sistema saturado:

PIPERIDINA

2b.- Presencia de doble ligadura:

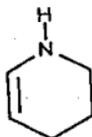
TETRADEHIDRO

3b.- Posiciones:

2,3,5,6

4b.- Nombre del compuesto:

2,3,5,6-TETRADEHIDROPIPERIDINA



21

1a. AZINA

1b. PIPERIDINA

2a. TETRAHIDRO

2b. DIDEHIDRO

3a. 1,2,3,4

3b. 2,3

4a. 1,2,3,4-TETRAHIDROAZINA

4b. 2,3-DIDEHIDROPIPERIDINA



22

1a. OXOL

2a. DIHIDRO

3a. 2,3

4a. 2,3-DIHIDROOXOL

1b. OXOLANO

2b. DIDEHIDRO

3b. 2,3

4b. 2,3-DIDEHIDROOXOLANO



23

1a. OXOL

2a. DIHIDRO

3a. 2,5

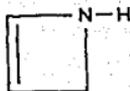
4a. 2,5-DIHIDROOXOL

1b. OXOLANO

2b. DIDEHIDRO

3b. 3,4

4b. 3,4-DIDEHIDROOXALANO



24

1a. AZETO

1b. AZETIDINA

2a. DIHIDRO

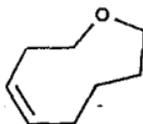
2b. DIDEHIDRO

3a. 1,2

3b. 2,3

4a. 1,2-DIHIDROAZETO

4b. 2,3-DIDEHIDROAZETIDINA



25

1a. OXONINA

1b. OXONANO

2a. HEXAHIDRO

2b. DIDEHIDRO

3a. 2,3,4,5,8,9

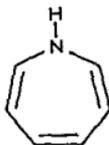
3b. 5,6

4a. 2,3,4,5,8,9-HEXAHIDROOXONINA

4b. 4,5-DIDEHIDROOXONANO

IV) Cuando el mismo nombre se emplea para dos o más sistemas de anillos isoméricos, que contienen el máximo número de dobles enlaces conjugados, dicho nombre puede hacerse específico señalando las posiciones que no presentan insaturación. Tales posiciones se indican por medio de una letra 'H' que precede al nombre del compuesto en cuestión.

La numeración en estos compuestos inicia por el heteroátomo y continúa por aquella dirección que asigne el menor valor posible a la posición saturada (Ejemplos 26-30).



26

1.-Sistema insaturado:

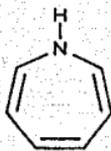
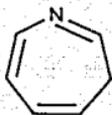
AZEPINA

2.-Posición que indica la ausencia de insaturación:

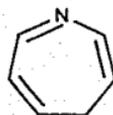
1 H

3.- Nombre del Compuesto:

1 H-AZEPINA



27



1. AZEPINA

2. 3H

3. 3H-AZEPINA

1. AZEPINA

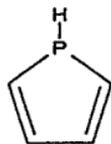
2. 1H

3. 1H-AZEPINA

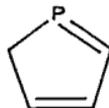
1. AZEPINA

2. 4H

3. 4H-AZEPINA



28



1. FOSFOL

2. 1H

3. 1H-FOSFOL

1. FOSFOL

2. 2H

3. 2H-FOSFOL

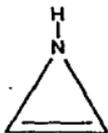


29



1. OXINA
 2. 4H
 3. 4H-OXINA
-

1. OXINA
2. 2H
3. 2H-OXINA



30



1. AZIRINA
 2. 1H
 3. 1H-AZIRINA
-

1. AZIRINA
2. 2H
4. 2H-AZIRINA

TABLE 1.

PREFIJOS PARA NOMENCLATURA DE COMPUESTOS HETEROCICLICOS
MONOCANULARES (SISTEMA DE HANTSCH-WIDMAN)

| Elemento | Valencia | Prefijo |
|-----------|----------|----------|
| Fióor | I | Fluora |
| Cloro | I | Clora |
| Bromo | I | Broma |
| Iodo | I | Ioda |
| Oxígeno | II | Oxa |
| Azufre | II | Tia |
| Selenio | II | Selena |
| Telurio | II | Telura |
| Nitrógeno | III | Aza |
| Fósforo | III | * Fosfa |
| Arsénico | III | * Arsa |
| Antimonio | III | * Estiba |
| Bismuto | III | Bisma |
| Silicio | IV | Sila |
| Germanio | IV | Germa |
| Estaño | IV | Estafa |
| Plomo | IV | Plumba |
| Boro | III | Bora |
| Aluminio | III | Alumina |
| Gallo | III | Gala |
| Indio | III | Inda |
| Talio | III | Tala |
| Berilio | II | Berila |
| Magnesio | II | Magnesa |
| Zinc | II | Zinca |
| Cadmio | II | Cadma |
| Mercurio | II | Mercura |

*: Cuando la terminación correspondiente es 'ina' el prefijo FOSFA pasa a FOSFOR, ESTIBA a ANTIMON y ARSA a ARSEN.

**SUFIJOS PARA NOMENCLATURA DE COMPUESTOS HETEROCICLICOS
MONOANULARES (SISTEMA DE HANTISCH-WIDMAN)**

TABLA 2a: SUFIJOS PARA COMPUESTOS CON NITROGENO

| Tamaño del Anillo | Saturado | Insaturado |
|-------------------|----------|------------|
| 3 | iridina | irina * |
| 4 | etidina | eto(e) * |
| 5 | olidina | ol |
| 6 | c | ina |
| 7 | c | epina |
| 8 | c | ocina |
| 9 | c | onina |
| 10 | c | ecina |

c: Se expresa mediante el prefijo perhidro
unido al nombre del compuesto insaturado
correspondiente.

TABLA 2b: SUFIJOS PARA COMPUESTOS SIN NITROGENO

| Tamaño del Anillo | Saturado | Insaturado |
|-------------------|----------|------------|
| 3 | irano | ireno * |
| 4 | etano | eto(e) * |
| 5 | olano | ol |
| 6 | ano | ina |
| 7 | epano | epina |
| 8 | ocano | ocina |
| 9 | onano | onina |
| 10 | ecano | ecina |

*: Se consideran dos opciones debido a que
las fuentes de información en español no
son consistentes.

SISTEMAS HETEROCICLICOS FUSIONADOS

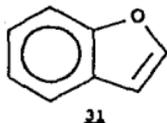
I) Para dar nombre a entidades heterocíclicas que implican anillos fusionados, y que están formados de una parte hidrocarbonada y por ende de una heterocíclica, la parte heterocíclica se selecciona como compuesto patrón y la otra como anillo fusionado. Esta última se indica mediante un prefijo (Tabla 3), mientras que la parte prioritaria se indica de manera preferente con su respectivo nombre trivial. La fusión se representa con una letra minúscula encerrada en un paréntesis rectangular, la cual determina la cara de la parte heterocíclica a la que se ha fusionado la parte hidrocarbonada. Para esto al componente base se le numerarán sus caras asignándose la letra 'a' a la cara comprendida entre los átomos 1 y 2, cara 'b' entre los átomos 2 y 3, etc.

En algunos casos es necesario además de especificar la cara en la que se está fusionando el componente base, las posiciones del anillo secundario que se fusiona al sistema patrón. Esto se realiza de la siguiente forma:

a) Una vez elegido el sistema base y etiquetadas sus caras, se enumerarán los átomos del anillo secundario como si fuera un sistema independiente.

b) Dado que al anillo sustituyente le debe corresponder la cara de fusión de menor numeración, se establece de esta forma hacia donde se efectuará la numeración de las caras: en sentido de las manecillas del reloj o en sentido contrario, cuando es monoanular.

Cuando el sistema patrón es de más de un anillo, la posición uno le corresponde al átomo que se encuentra en el anillo más a la derecha y en la parte superior de éste, numerándose el resto de los átomos en sentido de las manecillas del reloj única y exclusivamente. (Ejemplos 31-35).



1.- Parte hidrocarbonada:

BENCENO

2.- Prefijo:

BENZO

3.- Parte heterocíclica:

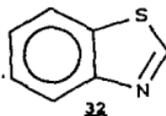
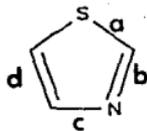
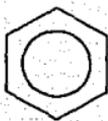
FURANO

4.- Fusión:

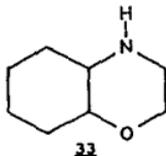
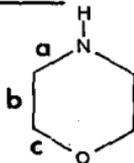
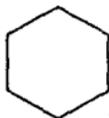
[b]

5.- Nombre del compuesto:

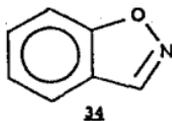
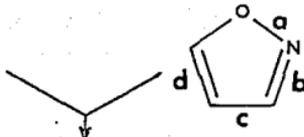
BENZO[b]FURANO



1. BENCENO 2. BENZO 3. TIAZOL 4. [d]
5. BENZO[d]TIAZOL



1. CICLOHEXANO 2. CICLOHEXAN 3. MORFOLINA 4. [b]
4. CICLOHEXAN[b]MORFOLINA



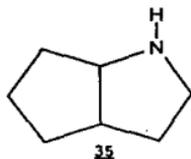
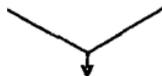
1. BENCENO

2. BENZO

3. ISOXAZOL

4. [d]

4. BENZO[d]ISOXAZOL



1. CICLOPENTANO

2. CICLOPENTAN

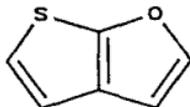
3. PIRROLIDINA

4. [b]

5. CICLOPENTANO[b]PIRROLIDINA

II) Sin embargo, si los dos anillos fusionados son heterocíclicos, las recomendaciones para seleccionar el sistema base, deben tomar en cuenta una serie de consideraciones (Ejemplos 36-42). La fusión será indicada por medio de: caras para los sistemas base y posiciones con número arábigo, para los sistemas secundarios.

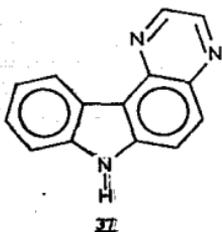
A) Si el sistema presenta heteroátomos diferentes al nitrógeno, se les dará preferencia a los heteroátomos de acuerdo con la posición que guardan éstos en la tabla periódica, de acuerdo a lo indicado en el esquema 1.



36

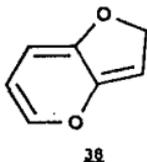
TIENO[2,3-b]FURANO

B) Preferencia al compuesto que contiene el mayor número de anillos.



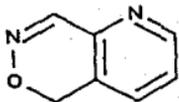
7 H-PIRAZO[2,3-c]CARBAZOL

C) Preferencia al compuesto que contiene el anillo individual de mayor tamaño.



2 H-FURO[3,2-b]PIRANO

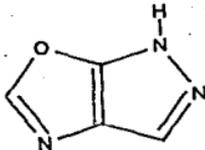
D) Preferencia al componente que contiene el mayor número de heteroátomos de cualquier clase.



39

5 H-PIRIDO[2,3-d]-OXAZINA

E) Preferencia al compuesto que contiene la mayor variedad de heteroátomos.

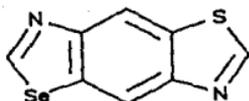


40

1 H-PIRAZOLO[4,3-d]OXAZOL

28

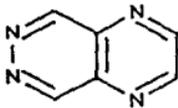
F) Preferencia para asignar como sistema base al compuesto que contiene al mayor número de heteroátomos de los listados en la Tabla 1.



41

SELENAZOLO[5,4-f]BENZOTIAZOL

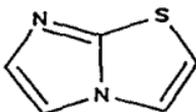
G) Si los componentes a ser fusionados presentan similitud en el tamaño del anillo, así como en el número y clase de heteroátomos, la alternativa para escoger al sistema base es elegir al anillo que presenta la menor posición de los heteroátomos.



42

PIRAZO[2,3-d]PIRIDAZINA

III) Si una posición de fusión es ocupada por un heteroátomo, el nombre de los anillos o componentes a ser fusionados son escogidos como si ambos tuviesen el heteroátomo.



43

IMIDAZO[2,1-b]THIAZOL

TABLE 3.

PREFIJOS PARA NOMENCLATURA DE COMPUESTOS HETEROCICLICOS FUSIONADOS

| Compuesto | Prefijo |
|--------------|-------------|
| Ciclopentano | Ciclopentan |
| Ciclohexano | Ciclohexan |
| Benceno | Benzo |
| Furano | Furo |
| Tiofeno | Tieno |
| Pirrol | Pirro |
| Imidasol | Imidazo |
| Isoxazol | Isoxazo |
| Furazano | Furazo |
| Selenazol | Selenazolo |
| Piridina | Pirido |
| Pirazina | Pirazo |
| Pirimidina | Pirimido |
| Quinolina | Quino |
| Isoquinolina | Isoquino |
| Ftalaxina | Ftalazo |
| Quinoxalina | Quinoxo |
| Carbasol | Carbaso |
| Fenazina | Fenazo |
| Fenotiazina | Fenotiazo |

SISTEMA CHEMICAL ABSTRACTS Y STELZNER
(NOMENCLATURA DE REMPLAZO)

Los nombres de los compuestos heterocíclicos pueden ser tambien formados anteponiendo el prefijo (ver Tabla 1) a los nombres correspondientes del sistema homocíclico. En donde la última vocal del prefijo no debe ser omitida.

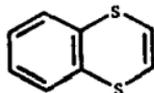
Existen dos métodos para aplicar este principio:

A) Metodo de Stelzner:

Para indicar las posiciones saturadas este método considera todas las posiciones del compuesto que presentan saturación y se señalan mediante el uso del prefijo "hidro".

B) Metodo de Chemical Abstracts:

En este caso, las posiciones de los heteroátomos presentes en el esqueleto del compuesto homocíclico son denotadas por el prefijo correspondiente y unicamente las posiciones que presentan saturación se señalan anteponiendo la letra 'H'. Ejemplos (44-47).



44

STELZNER

CHEMICAL ABSTRACTS

1. Identificación del sistema homocíclico:

NAFTALENO

NAFTALENO

2. Selección del prefijo correspondiente de acuerdo a:

- * Tipo de heteroátomo
- * Multiplicidad
- * Posición de heteroátomo en el anillo

1,4-DITIA

1,4-DITIA

3. Posiciones con ausencia de insaturación:

1,4-DIHIDRO

4. Nombre del compuesto:

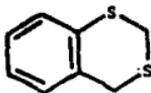
1,4-DITIA-1,4-DIHIDRONAFTALENO

1,4-DITIANAFTALENO



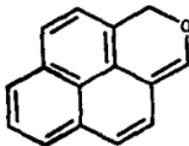
45

- A) SILA-2,4-CICLOPENTADIENO
 - B) SILA-2,4-CICLOPENTADIENO
-



46

- A) 1,3-DITIA-1,2,3,4-TETRAHIDRONAFTALENO
- B) 4H-1,3-DITIANAFTALENO



47

A) 2-OXA-1,2-DIHDROPIRENO

B) 1H-2-OXAPIRENO

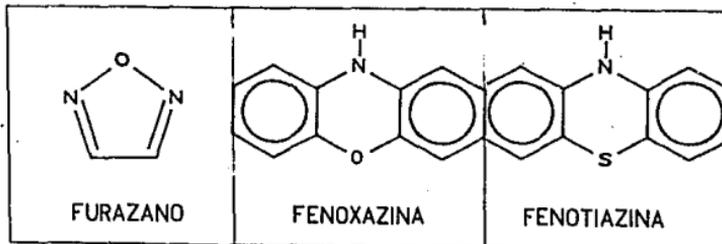
NOMBRES TRIVIALES DE SISTEMAS HETEROCICLICOS

Con el objeto de simplificar la nomenclatura de algunos sistemas, se ha aceptado que se haga referencia a ellos con nombres comunes o triviales. Normalmente éstos no reflejan de forma inmediata la estructura del compuesto, sin embargo su manejo, en ocasiones, hace más simple el reconocimiento de estas entidades.

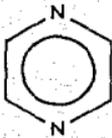
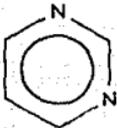
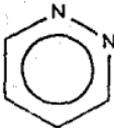
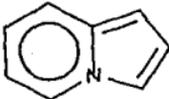
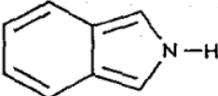
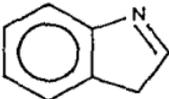
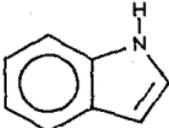
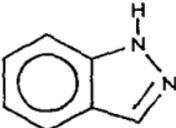
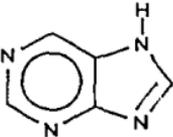
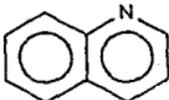
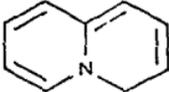
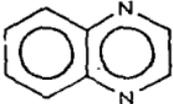
BLOQUE A: En este apartado se presenta una lista de sistemas heterocíclicos con nombres triviales y semitriviales, los que se recomiendan para ser utilizados en la nomenclatura de compuestos fusionados.

BLOQUE B: Las entidades correspondientes a este bloque con nombre trivial y semitrivial no se recomiendan para ser utilizados en la nomenclatura de compuestos fusionados.

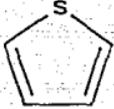
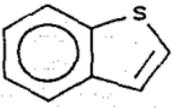
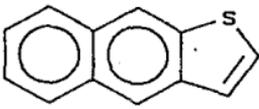
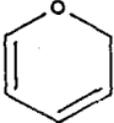
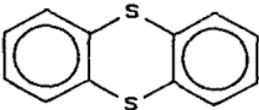
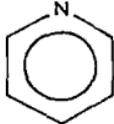
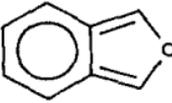
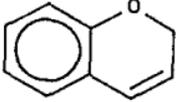
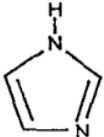
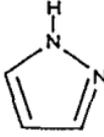
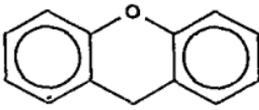
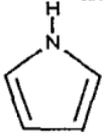
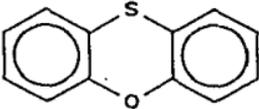
BLOQUE A



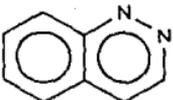
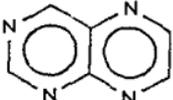
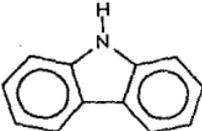
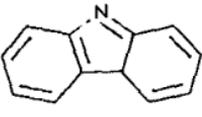
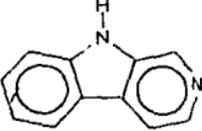
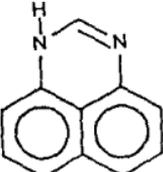
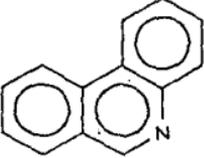
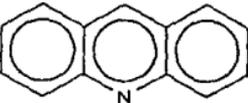
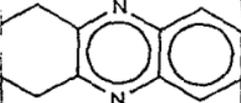
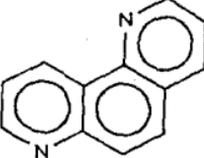
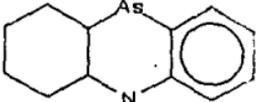
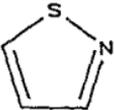
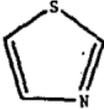
BLOQUE A

| | | |
|--|--|--|
|  <p>PIRAZINA</p> |  <p>PIRIMIDINA</p> |  <p>PIRIDAZINA</p> |
|  <p>INDOLIZINA</p> |  <p>ISOINDOL</p> |  <p>3 H-INDOL</p> |
|  <p>1 H-INDOL</p> |  <p>1 H-INDAZOL</p> |  <p>PURINA</p> |
|  <p>QUINOLINA</p> |  <p>ISOQUINOLINA</p> |  <p>4 H-QUINOLIZINA</p> |
|  <p>FTALAZINA</p> |  <p>NAFTIRIDINA</p> |  <p>QUINOXALINA</p> |

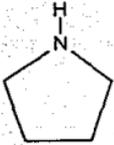
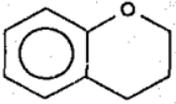
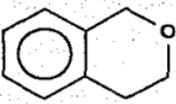
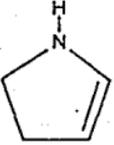
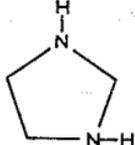
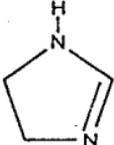
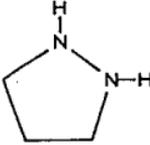
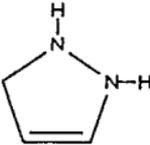
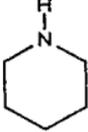
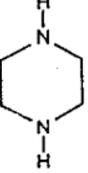
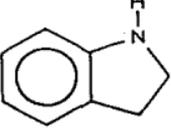
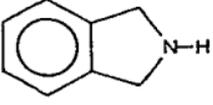
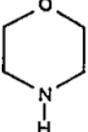
BLOQUE A

| | | |
|---|--|--|
|  <p>TIOFENO</p> |  <p>BENZO[b]TIOFENO</p> |  <p>NAFTO[2,3-b]TIOFENO</p> |
|  <p>FURANO</p> |  <p>2 H-PIRANO</p> |  <p>TIANTRENO</p> |
|  <p>PIRIDINA</p> |  <p>ISOBENZOFURANO</p> |  <p>2 H-CROMENO</p> |
|  <p>IMIDAZOL</p> |  <p>PIRAZOL</p> |  <p>XANTENO</p> |
|  <p>2 H-PIRROL</p> |  <p>1 H-PIRROL</p> |  <p>FENOXANTINA</p> |

BLOQUE A

| | | |
|---|---|---|
|  |  |  |
| QUINAZOLINA | CINOLINA | PTERIDINA |
|  |  |  |
| CARBAZOL | 4a H-CARBAZOL | CARBOLINA |
|  |  |  |
| PERIMIDINA | FENANTRIDINA | ACRIDINA |
|  |  |  |
| FENAZINA | FENANTROLINA | FENARSAZINA |
|  |  |  |
| ISOTIAZOL | ISOXAZOL | THIAZOL |

BLOQUE B

| | | |
|---|---|--|
|  <p>PIRROLIDINA</p> |  <p>CROMANO</p> |  <p>ISOCROMANO</p> |
|  <p>2-PIRROLINA</p> |  <p>IMIDAZOLIDINA</p> |  <p>2-IMIDAZOLINA</p> |
|  <p>PIRAZOLIDINA</p> |  <p>PIRAZOLINA</p> |  <p>PIPERIDINA</p> |
|  <p>PIPERAZINA</p> |  <p>INDOLINA</p> |  <p>ISOINDOLINA</p> |
|  <p>MORFOLINA</p> |  <p>QUINUCLIDINA</p> | |

EJERCICIOS

Cuando las especies químicas mostradas en la fig. 1 se probaron *in vivo* contra *S. aureus*, *E. coli.*, y *P. piocinea* mostraron considerable actividad antimicrobiana¹. Asignar un nombre adecuado a cada una de ellas.

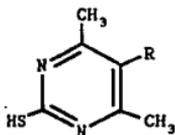


fig. 1

| R | Nombre del compuesto |
|----------------------|----------------------|
| H | |
| $C_6H_5-N=N-$ | |
| $p-NO_2-C_6H_4-N=N-$ | |

Una serie homóloga de N-(5-aril-1,3,4-oxadiazol-2-il) propanamidas y butanamidas fueron sintetizadas a partir de sus correspondientes 2-amino-5-aril-1,3,4-oxadiazoles. Las entidades químicas así obtenidas presentaron actividad como anestésico local.²

Dar las estructuras de ellos considerando como sustituyentes (5-aril) a los siguientes sistemas: C_6H_5 , α -Naf, β -Naf, p-OH- C_6H_4 .

Ciertos benzoxazoles (3) , benzotiazoles (4) y benzoimidazoles (5), como los reportados en la fig. 2, han mostrado tener tanto actividad bactericida como fungicida³.

Dar un nombre para cada una de ellos.

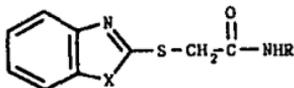


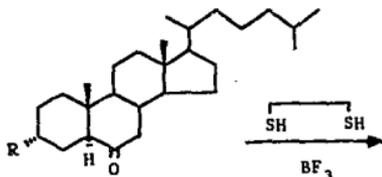
fig 2

(3): X= O ; (4): X= S ; (5): X= NH

| R | Nombre del compuesto | |
|-----------------------------------|----------------------|--|
| C ₆ H ₅ | (3) | |
| | (4) | |
| | (5) | |
| p-ClC ₆ H ₄ | (3) | |
| | (4) | |
| | (5) | |

En la literatura química⁴ se reporta la importancia y potencial farmacológico de diversos etilenditiocetales (1,3-ditioanos) productos de la protección de diversos compuestos carbonílicos derivados del colesterol.

Proponer la estructura de algunos de estos compuestos de acuerdo al siguiente esquema de formación de ellos.



R

a: H

b: OAc

c: Cl

d: I

Desde hace 20 años se ha venido incrementando el interés en la química medicinal por el uso de diversos Tiofenos sustituidos.⁵ A raíz de ello P.K.Sen⁶ reportó la síntesis de compuestos análogos a los de la fig.3. Dar un nombre para estas especies químicas.

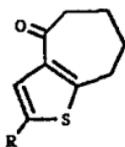


fig.3

| R | Nombre del compuesto |
|----|----------------------|
| H | |
| Me | |
| Et | |

En 1983 Sherief y Colls⁷ reportan la síntesis de varios derivados de la Acridina⁸⁻¹². Estos exhiben propiedades tanto antibacteriana, antimalaria, como de anestésico local. Esta síntesis se inicia con la transformación de la 9-Acridona a 9-mercaptoacridina con pentasulfuro de fósforo en piridina anhidra. Dibujar la estructura de los anteriores compuestos.

Diversos derivados heterocíclicos nitrogenados (fig.4), han sido probados como agentes antihipertensivos, vasodilatadores, así como β -adrenérgico-bloqueadores¹³. Dar nombre a cada uno de los compuestos representados en la figura mencionada.

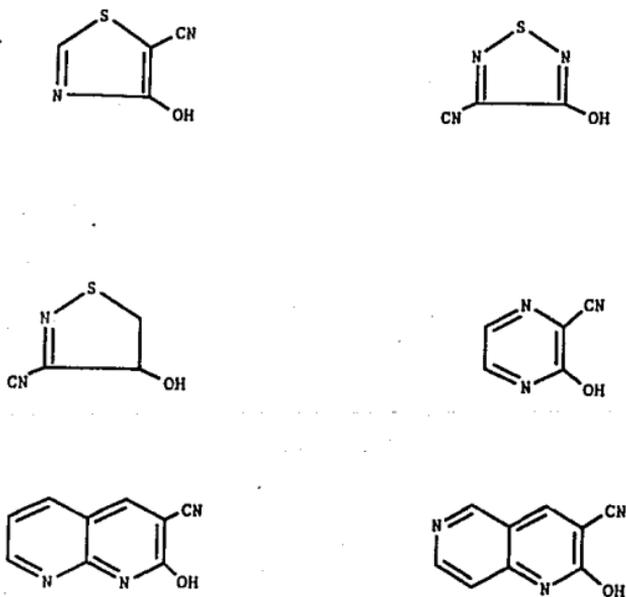
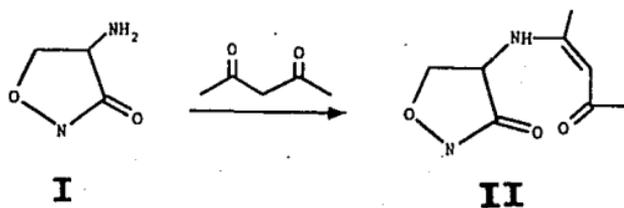


fig. 4

A principios de los 80's, Jensen y Friedman¹⁴, reportan la preparación de II a partir de I (Cicloserina), por condensación con acetilacetona. Con el producto de reacción, así como con algunos derivados de éste, se realizaron varios bioensayos sobre *S. aureus*. Escribir un nombre adecuado tanto para el sustrato como para el producto.



Un vasto interés se demuestra con la gran cantidad de publicaciones¹⁵⁻¹⁶, que en la literatura describen diversas maneras de preparar ditiolanos (fig.5). Esto debido en parte a la actividad hipotensora¹⁷ que suelen presentar muchos de ellos. Dar las estructuras apropiadas para la siguiente serie de especies de este tipo.

- a) Ditiolano de la Ciclohexanona.
- b) Ditiolano de la Benzenofenona.
- c) Ditiolano del Acetoacetato de etilo.
- d) β -Ditiolano de la Alcanforquinona.

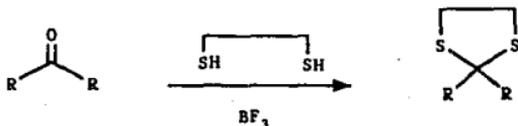


fig.5

Varios derivados del Imidazo[2,1-b]-1,3,4-tiadiazol presentaron propiedades como anticonvulsivos. Así mismo, debido a su alto grado de lipofilicidad presentan una amplia habilidad para penetrar el Sistema Nervioso Central¹⁸. Proponer una estructura para su esqueleto base.

Una serie de compuestos, como los presentados en la fig.6, fueron sintetizados y evaluados contra: Leucemia *in vitro* y contra Carcinoma de Lewis *in vivo*¹⁹. Asignar un nombre a las entidades heterocíclicas representadas en esta figura.

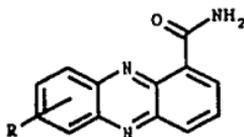


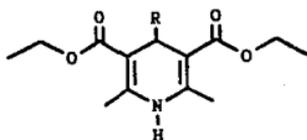
fig 6

| R | Nombre del compuesto |
|-----------|----------------------|
| 2-OMe | |
| 2-Cl | |
| 4-OMe | |
| 6-Me | |
| 7-Cl | |
| 3,4-Benzo | |
| 6,7-Benzo | |

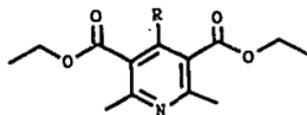
En la literatura química²⁰ se reporta la síntesis y la actividad anticonvulsiva del 2-aril-5-guanidino-1,3,4-tiadiazol. Dibujar la estructura de esta entidad química.

De una minuciosa revisión bibliográfica, resalta el gran interés que presentan tanto los ésteres de Hantzsch (1) como sus correspondientes piridinas (2). Este tipo de especies químicas manifiestan relevante actividad biológica, particularmente como: acrisidas, insecticidas, herbicidas y bactericidas, entre otros²¹⁻²³.

En consecuencia, en la literatura química se reportan múltiples opciones para la transformación química²⁴⁻²⁵ de 1 a 2. De acuerdo al esquema de oxidación mostrado, dar nombre a 1a-1d y 2a-2d.



1



2

| R | 1 | 2 |
|--|---|---|
| H | | |
| o-MeOC ₆ H ₄ | | |
| m-NO ₂ -C ₆ H ₄ | | |
| p-OH-C ₆ H ₄ | | |

En la literatura se reporta la síntesis y la actividad depresora en el SNC de la Fenadoxona (fig. 7), actuando sobre la membrana celular estabilizándola e impidiendo el paso del impulso nervioso²⁶.

Dar un nombre a esta entidad química.

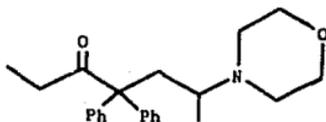


fig. 7

El Alopurinol²⁷ (fig.8), es un compuesto utilizado en Quimioterapia para provocar un aumento en la excreción renal de ácido úrico y, por lo tanto, descenso de la uricemia. Asignar un nombre a esta entidad química.

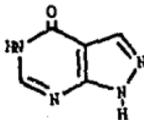


fig.8

Quando la especie química mostrada en la fig. 9 se probó in vitro contra *S. aureus*, mostró considerable actividad antimicrobiana²⁸. Asignar un nombre a esta entidad.

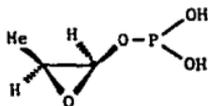


fig. 9

Diversos derivados del ácido 6-aminopenicilánico, como la Penicilina G.²⁹ (fig. 10), han sido probados como agentes antimicrobianos. Dar un nombre al compuesto representado en dicha figura.

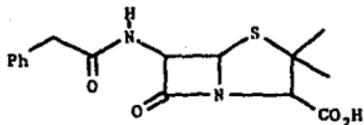


fig. 10

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- 1.- Se presenta un manual tutorial para nomenclatura en Química Heterocíclica.
- 2.- El material aquí presentado es el primero en su género no sólo en el idioma Español sino en cualquier otro.
- 3.- Así mismo se considera que el material propuesto es "propio" y acorde no sólo de las necesidades de nuestra Facultad sino también de cualquier otra Institución donde se imparta la Química Heterocíclica.

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA

1. S.C. Nigam, G.S. Saharia, Sharma H.R., *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,585, (1983).
2. V.K. Saxena, A.R. Singh, R.K. Agarwal, S.C. Mehra, *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,575, (1983).
3. H.A. El-Sherief, A.M. Mahmoud, A.E. Abdel-Rahman, G.M. El-Naggar, *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,58, (1983).
4. S.A. Shafiullah, J.H. Shamsuzzaman, B.Z. Khan, *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,364, (1983).
5. P.K. Sen, B. Kundu, T.K. Das, *J. Indian Chem. Soc.*, **55**,847, (1978).
6. P.K. Sen, B. Kundu, *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,303, (1983).
7. H.A.H. El-Sherief, A.E. Abdel-Rahman, A.M. Mahmoud, *J. Indian Chem. Soc.*, **60**,55, (1983).

8. J.H. Burkhalter, *J. Am. Chem. Soc.*, **70**,1363,(1948).
9. V.K. Mehta, S.R. Patel, *J. Indian Chem. Soc.*, **43**,235,(1966).
10. C.K. Bank, *J. Am. Chem. Soc.*, **66**,1127,(1944).
11. B. Belleau, G. Molek, *J. Am. Chem. Soc.*, **90**,1651,(1968).
12. S.J. Das Gupta, *J. Indian Chem. Soc.*, **18**,93,(1941).
13. J.J. Baldwin, E.L. Engelhardt, R. Hirschmann, G.S. Ponticello, *J. Med. Chem.*, **23**,65,(1980).
14. N.P. Jensen, J.J. Friedman, *J. Med. Chem.*, **23**,6,(1980).
15. H.P. Gervais, A. Rassat, *Bull. Soc. Chim. France.*, **743**,(1961).
16. R. Miranda, H. Cervantes, P. Joseph-Nathan, *Synth. Commun.*, **20**,153,(1990).

17. J.J. Lewis, M. Martin-Smith, T.C. Muir, S.N. Nanjappan, T. Reid, *J. Med. Chem.*, **6**, 711, (1963).
18. I.T. Barnish, P.E. Cross, R.P. Dickinson, B. Gadsby, M.J. Parry, M.J. Randall, I.W. Sinclair, *J. Med. Chem.*, **23**, 117, (1980).
19. G. W. Rewcastle, W.A. Denny, B.C. Baguley, *J. Med. Chem.*, **30**, 843, (1987).
20. C.B. Chapleo, P.L. Myers, A.C.B. Smith, I.F. Tulloch, D.S. Warter, *J. Med. Chem.*, **30**, 951, (1987).
21. U. Eisner, J. Kuthan, *J. Chem. Review.*, **72**, 1, (1972).
22. S.H. Jain, R. Kant, K.L. Dhar, S. Singh, G.B. Singh, *J. Indian Chem. Soc.*, **29**, 277, (1990).
23. F. Delgado, C. Alvarez, O. García, G. Penieres, *Synth. Commun.*, **21**, 619, (1991).
24. C. Alvarez, F. Delgado, O. García, S. Medina, C. Márquez, *Synth. Commun.*, **21**, 2137, (1991).

25. R. Miranda, C. Gutierrez, R. Castillo, E. Angeles, R. Cervantes, *The Fourth Chemical Congress of North America*, August 27, (1991).
26. J. Bockmuhl, H. Ehrhart, *Ann.*, 52, 561, (1948).
27. H. Litter, *Compendio de Farmacologia.*, 3a. Ed., El Ateneo, (1984).
28. J. Glankowski, D.G. Perkins, R.P. Dickinson, *J. Org. Chem.*, 35, 3510, (1978).
29. P. Behrens. *J. Biol. Chem.*, 175, 793, (1948).
30. A.J. Manson, F.W. Stonner, H.C. Neumann, R.G. Christensen, R.L. Clarke, J.H. Ackerman, D.F. Page, J.W. Dean, D.K. Phillips, G.O. Potts, A. Arnold, A.L. Beyler, R.O. Clinton, *J. Med. Chem.*, 6, 1, (1963).
31. H. Lehr, S. Karlan, M.W. Goldberg, *J. Chem. Soc.*, 6, 136, (1962).

32. K.P. Birendra, U.P. Basu., J. Indian Chem. Soc., 46, 1121, (1969).
33. N.S. Jagadish, A.B. Lal., J. Indian Chem. Soc., 40, 195, (1963).
34. H.S. Shingare, D.B. Ingle., J. Indian Chem. Soc., 53, 1036, (1976).
35. S. Hari, J.C. Verma., J. Indian Chem. Soc., 40, 31, (1963).
36. S.K. Kundra, P. Jain, V. Kushwana, M. Katyal, R.P. Singh., J. Indian Chem. Soc., 53, 715, (1976).
37. C. Mahan, G.S. Saharia, H.R. Sharma., J. Indian Chem. Soc., 53, 827, (1976).
38. S. Turner, M. Myers, B. Gadie, A.J. Nelson, R. Pape, J.F. Saville, J.C. Doxey, T.L. Berridge., J. Med. Soc., 31, 902, (1988).
39. S. Turner, M. Myers, B. Gadie, A.J. Nelson, R. Pape, J. F. Saville, J.C. Doxey, T.L. Berridge., J. Med. Chem., 31, 906, (1988).
40. J.J. Kamiski, D.G. Perkins, J.D. Frantz, D.H. Solomon, A.J. Elliott, P.J.S. Chiu, J.F. Long., J. Med. Chem., 30, 2047, (1987).

41. A.M. Monro, R.M. Quinton, T.I. Wrigley., *J. Med. Chem.*, **6**, 255, (1963).

42. K.C. Joshi, S. Giri., *J. Indian Chem. Soc.*, **39**, 617, (1962).

43. J.H. Billman, L.C. Dorman., *J. Org. Chem.*, **6**, 701, (1963).

44. A. Shoeb, S.P. Popli, M.L. Dhar., *J. Indian Chem. Soc.*, **40**, 369, (1963).

45. International Union of Pure and Applied Chemistry
'Nomenclature of Organic Chemistry', Sections A, B, C, D, E, F, and H,
edition, Pergamon Press, Oxford, 1979: [a] p.53-55; [b] Rule
B-1.1, Table I, footnotes, p.53; [c] Rule B-1.1, Table II,
footnote (d), p.53; [d] Rule B-1.1, Table I, footnote, p.53; [e]
Rule B-1.1, Table I, footnote, and Table II, footnote (b), p.53;
[f] Rule B-1.2 exception, p.54; [g] Rules 1.51-1.53, p.55; [h]
pp.55-63; [i] p.68.

46. International Union of Pure and Applied Chemistry,
'Nomenclature of Organic Chemistry (1957)', Section A and B, 1st
edition., Butterworths, London: [a] Rule B-1, pp.51-53; [b] Rule
B-1.1, Table I, p.51; [c] 2ed., Butterworths, London, 1966, Table
I, p.51.

47. International Union of Pure and Applied Chemistry, 'Definitive Rules of Organic Chemistry', *J. Am. Chem. Soc.*, **82**,5545, (1960).

48. International Union of Pure and Applied Chemistry, 'Revision of the Extended Hantzsch-Widman System of Nomenclature for Heteromonocycles', Provisional Recommendations, *Pure Appl. Chem.*, **51**,1995, (1979).

49. International Union of Pure and Applied Chemistry, 'The Designation of Non standar Classical Valence Bonding in Organic Nomenclature (Provisional)', *Pure Appl. Chem.*, **54**,217, (1982).

50. International Union of Pure and Applied Chemistry, 'Revision of the Extended Hantzsch-Widman System of Nomenclature for Heteromonocycles', Recommendations, *Pure Appl. Chem.*, **55**,409, (1983).