



NOMENCLATURA DE HETEROCÍCLOS UTILIZANDO EL SISTEMA DE NOMENCLATURA HANTZSCH-WIDMAN

Kevin Arturo Juárez Ornelas, Yuvraj Satkar, Velayudham Ramandoss, Pradip D. Nahide y
César R. Solorio Alvarado*

Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato. División de Ciencias Naturales y Exactas. Departamento de Química. Noria Alta S/N. Guanajuato, Guanajuato. C.P. 36050.

csolorio@ugto.mx

Resumen: La nomenclatura de los sistemas heterocíclos es un tema de importancia en el desarrollo de esta asignatura en nivel superior. El presente artículo tiene como objetivo facilitar el aprendizaje del estudiante al momento de dar nombre a los sistemas heterocíclos mono- y polianulares.

Palabras Clave: Nomenclatura, Heterocíclos, Sistema Hantzsch-Widman.

Abstract: The nomenclature of heterocyclic systems is an issue of importance in the development of this subject at a higher level. The objective of this article is to facilitate student learning when naming heterogeneous mono- and polyannular systems.

Key words: Nomenclature, Heterocyclics, Hantzsch-Widman system.

En 1897 y 1888, Hantzsch¹ y Widman² de manera independiente introdujeron métodos para nombrar compuestos monocíclicos de cinco y seis miembros. Aunque con diferencias en algunos detalles, como el orden de los heteroátomos y la manera de indicar sus

posiciones en el anillo, ambos métodos fueron basados en el mismo principio, es decir la combinación de prefijos representando heteroátomos, con sistemas y representando el tamaño del anillo.

Los heteroátomos que se tomaron en cuenta fueron el oxígeno, el azufre y



selenio, adicionándose poco después el nitrógeno, y denotando los sistemas de cinco y seis miembros como -ol (-ole) e -in (-ine) respectivamente.³

En el Sistema se incluyeron otros tamaños de anillos, más heteroátomos y la expresión de varios niveles de hidrogenación,⁴ y estos cambios fueron documentados por Patterson y Capell en 1940 como un método sistemático para nombrar los heterociclos de un solo anillo.⁵

En 1957, la Comisión de Nomenclatura de Química orgánica de la IUPAC realizó una extensión del sistema de Hantzsch-Widman como parte de sus reglas para la nomenclatura de la química orgánica.

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

COMPUESTOS HETEROCÍCLIOS MONOANULARES

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



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

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

SUFIJO: Indica el grado de insaturación.

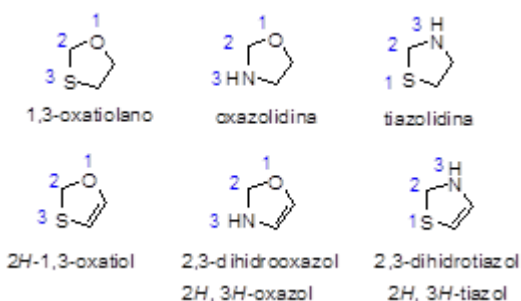
3. Cada heteroátomo se indica con una terminación específica (Tabla 1).

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



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



- Siempre que sea posible se asigna el menor número.

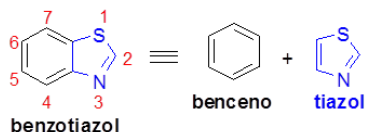
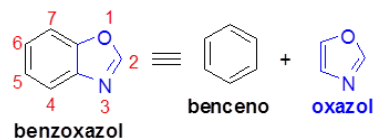
COMPUESTOS HETEROCÍCLIOS POLIANULARES FUSIONADOS

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

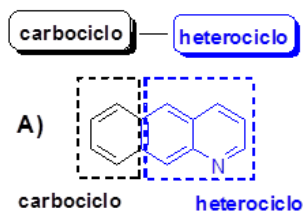
- Cuando un sistema monocíclico no tiene nombre trivial reconocido, este se construye a partir de las reglas anteriores (1-8).



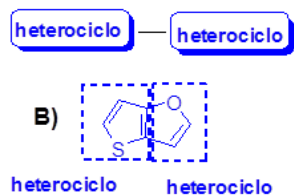
10. Los sistemas de heterociclos con anillos fusionados pueden tener cualquiera de las dos formas siguientes:



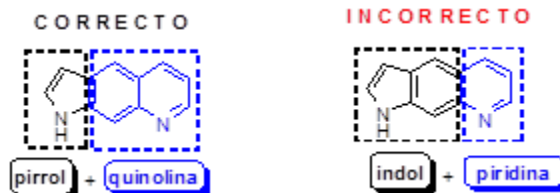
A. CARBOCICLO-HETEROCICLO



B. HETROCICLO-HETEROCICLO



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



ELECCIÓN DEL HETEROANILLO BASE:

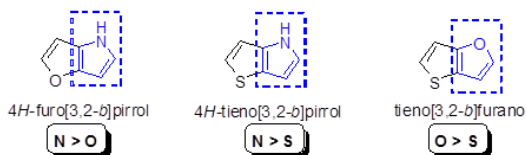
Para dar nombre al heterociclo, es necesario **IDENTIFICAR** el **heteroanillo base**, el **anillo secundario** y los sustituyentes.

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

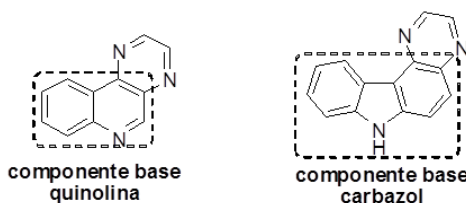
13. Para escoger el **heteroanillo base** en un sistema polianular fusionado HETEROCICLO-HETEROCICLO (inciso **B**, regla **10**), se da preferencia al heterociclo que tiene **NITRÒGENO** sobre el que tiene **OXÍGENO** sobre el que tiene **AZUFRE** (**N > O > S**). Sin embargo, al nombrar el compuesto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

Elección heteroanillo base: N > O > S.

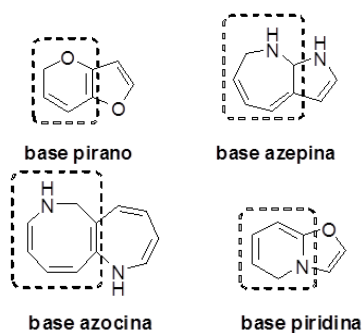
Dar nombre al sistema polianular: O > S > N.
(Regla 5).



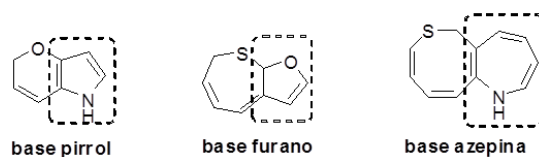
14. Si hay más de dos anillos presentes, se elige el componente que tiene mayor número de anillos con nombre trivial reconocido.



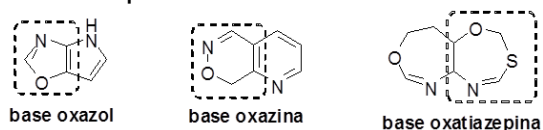
15. Si los anillos son de distinto tamaño y ambos contienen el mismo heteroátomo se escoge como sistema base el anillo el más grande.



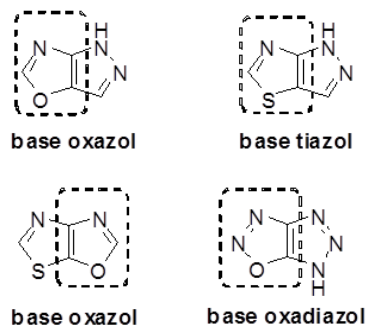
16. Si los anillos son de distinto tamaño y con heteroátomos distintos, el componente base se escoge según la regla 13 ($N > O > S$).



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



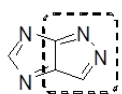
18. La **CANTIDAD** y **TIPO (diversidad)** de heteroátomos es importante. Si dos anillos fusionados del mismo tamaño tienen la misma cantidad de heteroátomos, el componente base será aquel con mayor tipo o diversidad de heteroátomos, conforme a la regla 13.



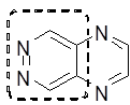
19. Si los componentes son del mismo tamaño y contienen el mismo número y tipo de heteroátomos, el componente



base es el anillo en el que los heteroátomos tengan los números mas bajos antes de la fusión.

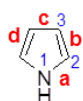


base pirazol

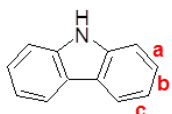


base piridazina

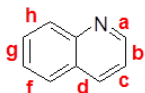
20. Los enlaces **del componente base** se designan como “caras”. La cara “a” corresponde al enlace 1,2; la cara “b” al enlace 2,3 etc.



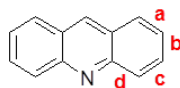
pirrol



9H-carbazol

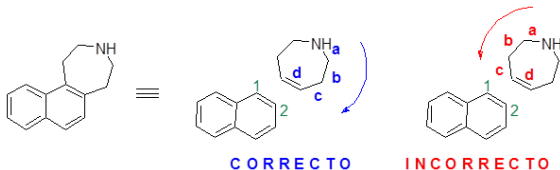


quinolina



acridina

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



22. El **segundo anillo heterociclo** se agrega al nombre como **prefijo** del componente base. El prefijo se establece al

sustituir la letra “a” del nombre por la letra “o” (Tabla 3).

Tabla 3

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

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

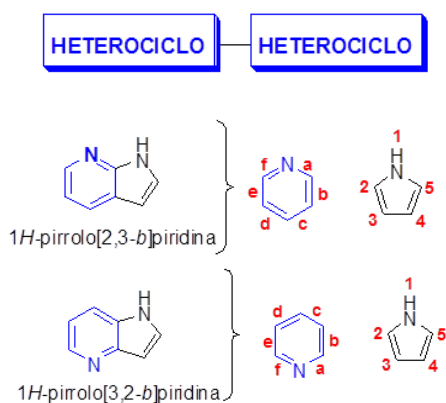
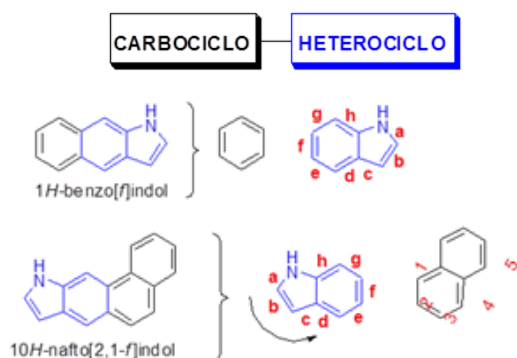


LA FUSIÓN DE LOS ANILLOS (CARBOCICLO-HETEROCICLO Y HETEROCICLO-HETEROCICLO)

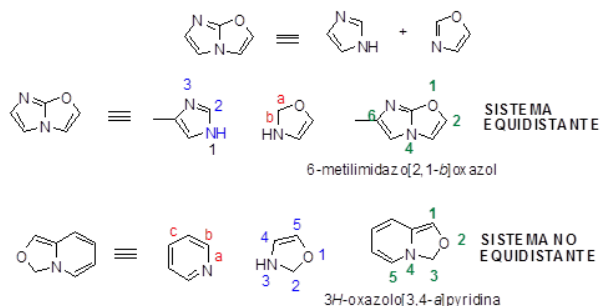
25. La **FUSIÓN** se indica entre corchetes, para hacerlo:

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

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



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

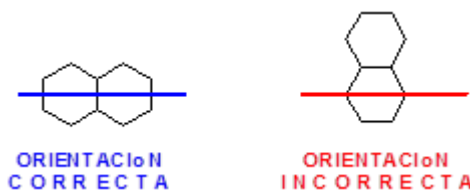


NUMERACIÓN DEL SISTEMA HETEROCICLO

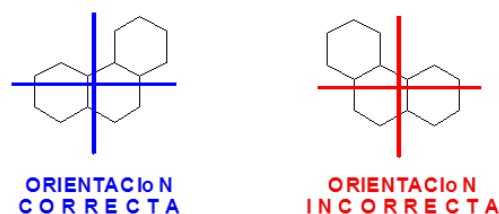
Para enumerar **CORRECTAMENTE** un sistema heterociclo hay que tener en cuenta las siguientes consideraciones:

Orientación del anillo

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



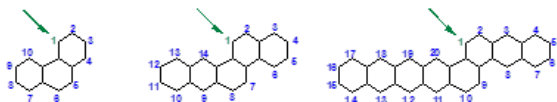
28. Del resto de los anillos, la mayoría deben encontrarse en el primer cuadrante.



29. La numeración comienza en el anillo situado en el primer cuadrante y continúa siguiendo

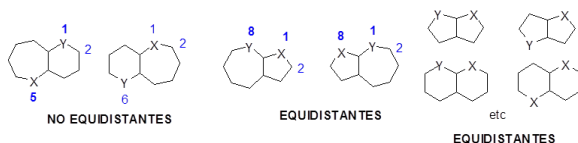


el giro de las manecillas del reloj.

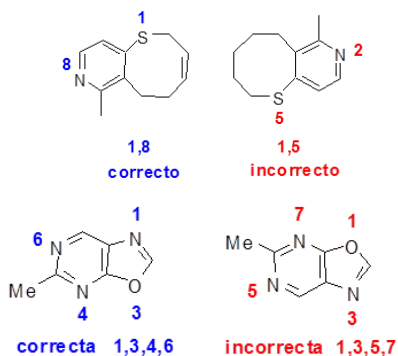


30. RESPECTO A LA POSICIÓN DE LOS HETEROÁTOMOS en los sistemas **heterociclo-heterociclo** deben considerar dos tipos de sistemas:

- A) NO EQUIDISTANTES
B) EQUIDISTANTES



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

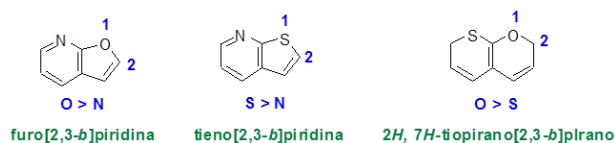


32. En los sistemas **EQUIDISTANTES** se

encuentran a su vez dos clases de sistemas:

A) SISTEMAS

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

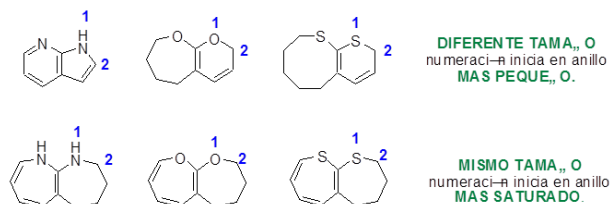


Ojo: anillo base se escoge siempre N>O>S

B) SISTEMAS

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

1. El anillo más pequeño **SI SON DE DIFERENTE TAMAÑO**.
2. El anillo más saturado **SI SON DE IGUAL TAMAÑO**.
3. El anillo base es el más saturado.

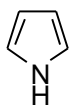




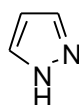
33. Para dar nombre al compuesto heterociclo se sigue el siguiente esquema:



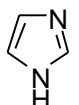
HETEROCICLOS CON NOMBRES TRIVIALES RECONOCIDOS POR LA IUPAC



pirrol



pirazol



imidazol



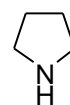
furano



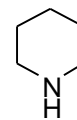
tiofeno



furazano



pirrolidina



piperidina



piridina



piridazina



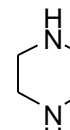
pirimidina



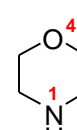
pirazina



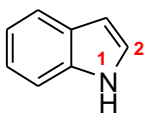
pirano



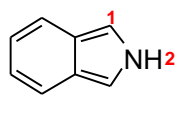
piperazina



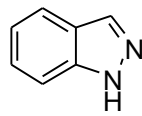
morfolina



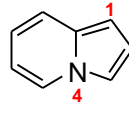
indol



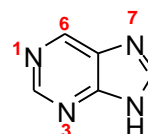
isoindol



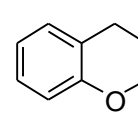
indazol



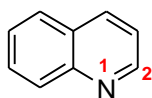
indazolina



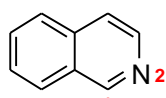
purina



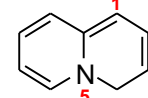
cromano



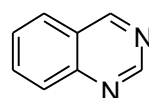
quinolina



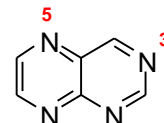
isoquinolina



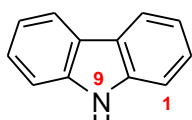
quinolizina



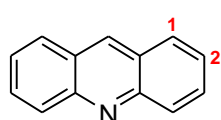
quinazolina



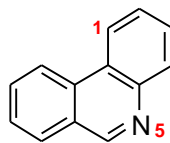
pteridina



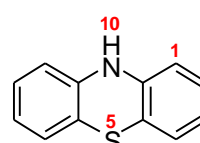
carbazol



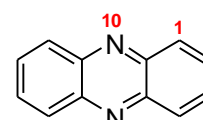
acridina



fenantidrina



fenotiazina



fenazina



Referencias:

1. Hantzsch; J. H. Weber, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.*, **1987**, *20*, 3118-3132
2. Widman, *J. Prakt. Chem.*, **1888**, *38*, 185-201.
3. W. H. Hale, *J. Am. Chem. Soc.*, **1919**, *41*, 370-378.
4. M. Patterson, *J. Am. Chem. Soc.*, **1938**, *50*, 3074-7078.
5. M. Patterson and L. I. Capell, *The Ring Index*, Reinhold, New York, **1940**, 20-21.