

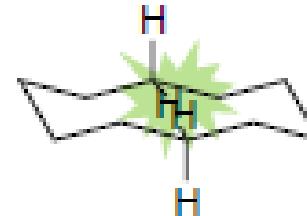
REACCIONES DE CICLIZACIÓN

Reacciones de ciclización

- Los ciclos pequeños son inestables debido principalmente a la tensión anular
- Los anillos medios son inestables debido principalmente a las interacciones estéricas transanulares

	Tamaño del anillo	$-T\Delta S$ (kcal/mol)	ΔH_{rel} (kcal/mol)	
Pequeño	3	-1.4	27	[]
	4	-1.2	26	[]
	5	-0.9	6	
	6	-0.7	0	
	7	-0.4	6	
	8	-0.1	9	[]
Medio	9	0.1	12	[]
	10	0.1	12	[]
	11		11	[]
	12	0.2	4	
Macrociclo	13		5	
	14	0	3	
	≥ 15	0	2	

Tensión anular   No llega a ser de 109.5 °

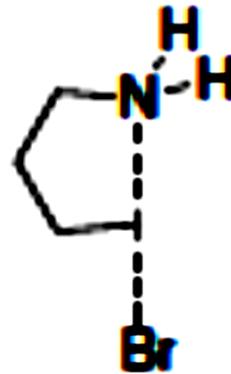
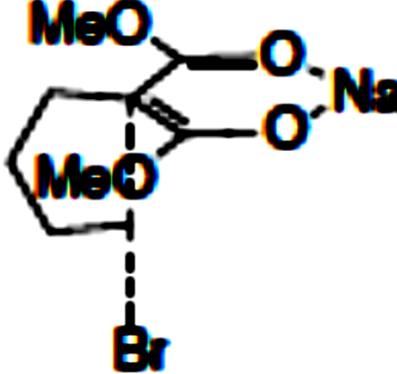
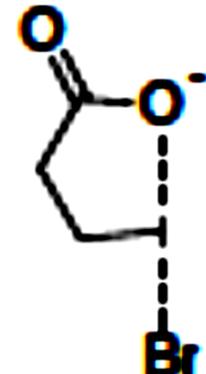
Impedimento estérico transanular  

Se ha estudiado el efecto del tamaño del anillo en la rapidez de ciclización, pero solo con reacciones S_N2

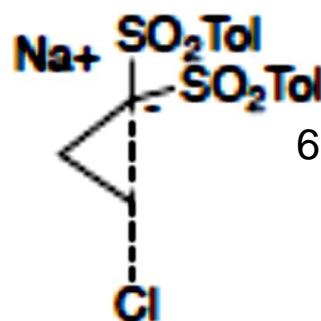
En general, la rapidez de ciclización sigue la siguiente tendencia:

$$5 > 6 > 3,4 \geq 7 > 8$$

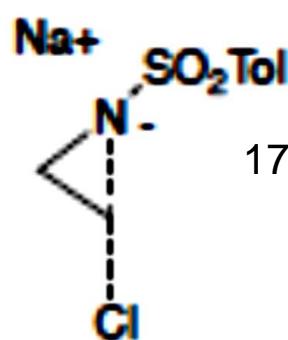
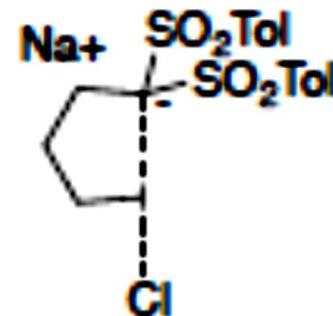
Influencia del tamaño del anillo contra rapidez de ciclización relativa en reacciones S_N2

Tamaño del anillo			
3	0.07	---	0.0008
4	0.001	0.58	0.3
5	100	833	90
6	1	1	1
7	0.002	0.009	0.005
8	---	0.0002	0.00008

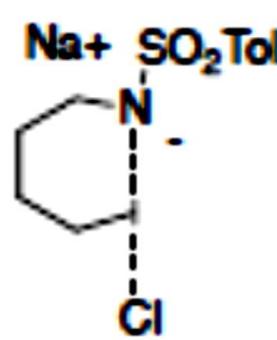
Hay excepciones en las cuales los anillos de 3 miembros se forman con mayor rapidez



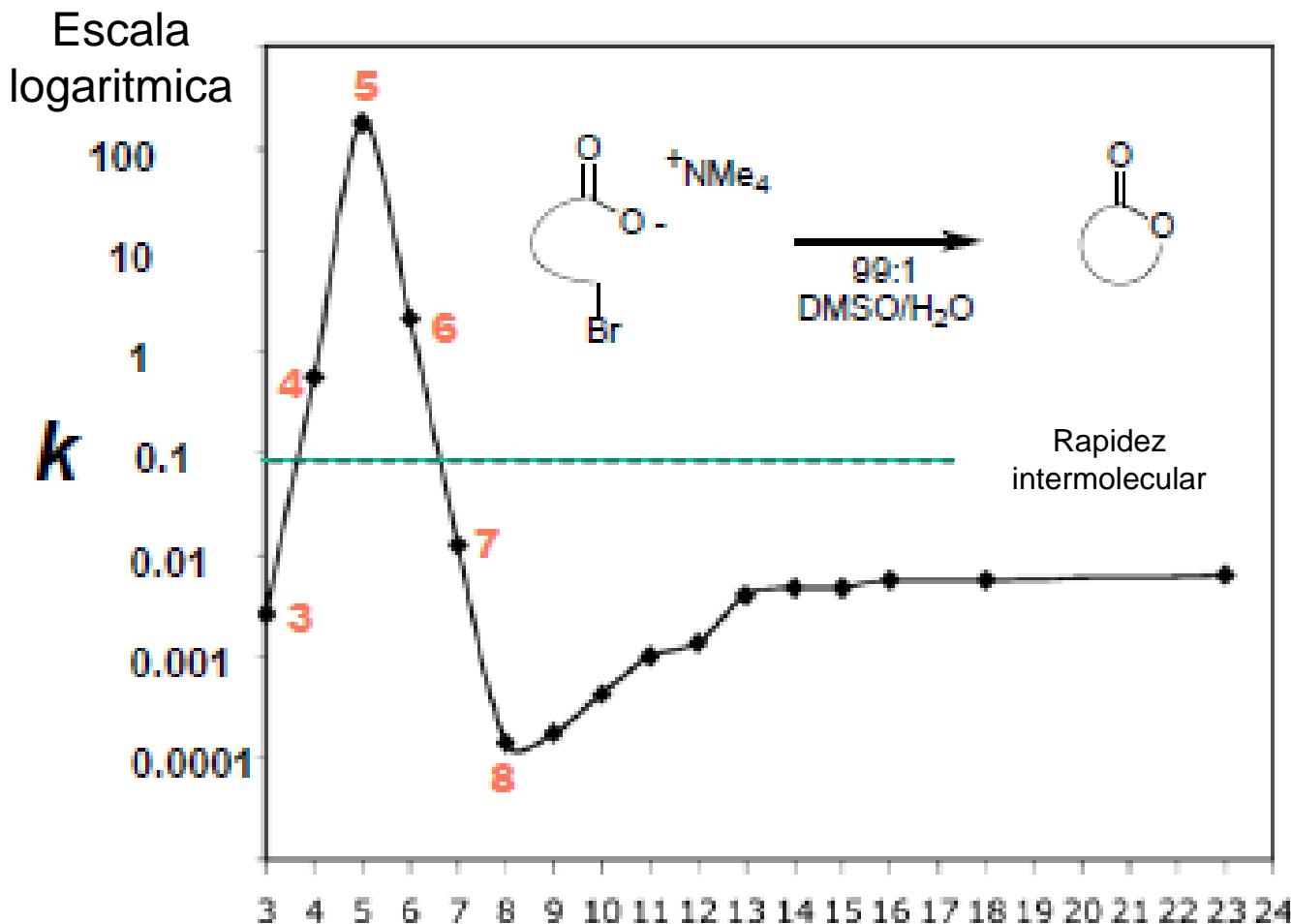
60 x más rápida que



17 x más rápida que



Los sustratos para reacciones de macrociclización requieren de mucho tiempo debido a conformaciones no productivas hacia el cierre del anillo



Reacciones de macrolactonización:
requieren de mucho tiempo debido a conformaciones no productivas
hacia el cierre del anillo

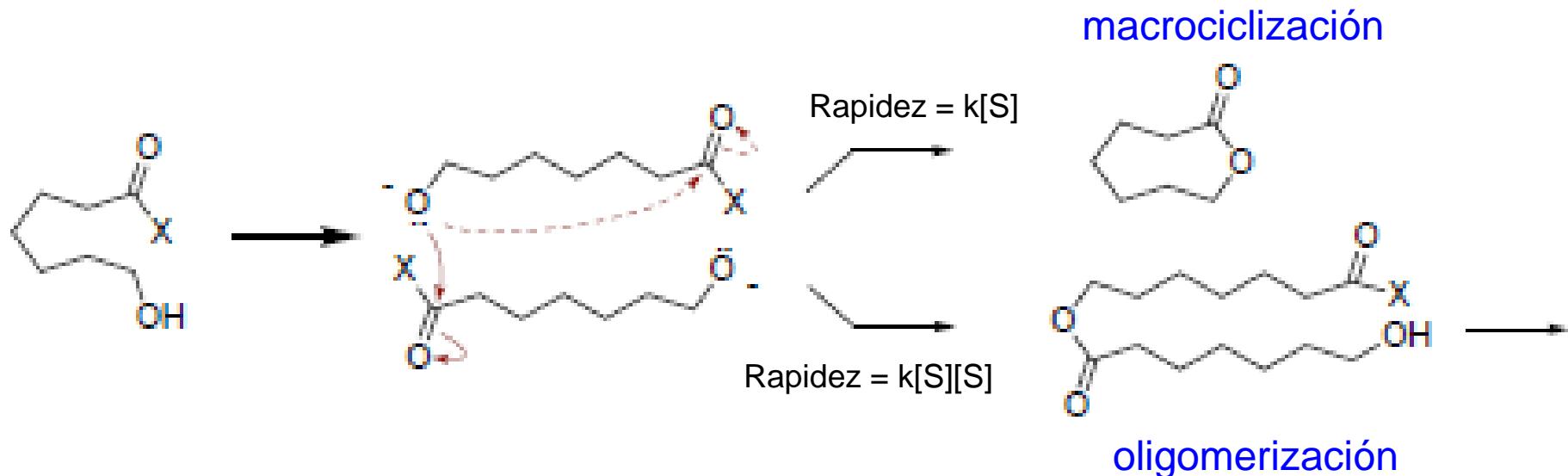


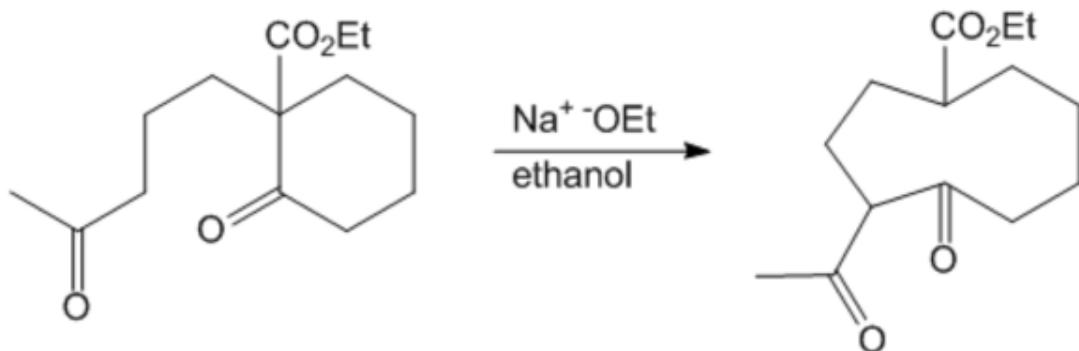
$$3^{11} = 177,147 \text{ conformaciones posibles}$$

Para intermediarios muy reactivos:

Hay una competencia entre oligomerización y la macrociclización

A condiciones de alta dilución ($< 0.005 \text{ M}$) se favorece la reacción de ciclización frente a la dimerización





This reaction involves an intramolecular aldol reaction followed by a *retro aldol-like* reaction. The steps involved are as follows:

1. Deprotonation to form enolate ion 1;
2. Cyclization via an intramolecular aldol reaction to form tetrahedral intermediate 2;
3. Collapse of the tetrahedral intermediate and bond cleavage to form enolate ion 3;
4. Protonation to form the final product.

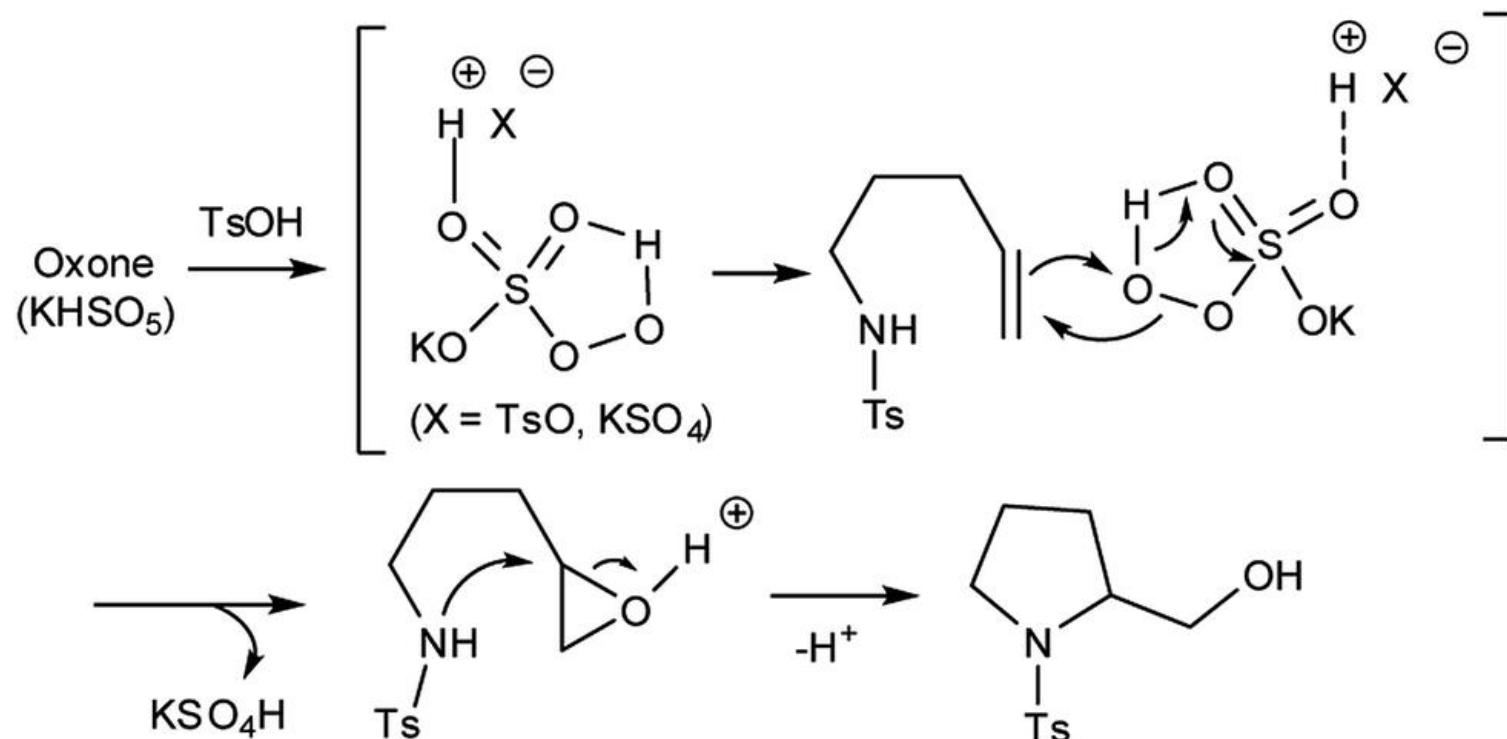
Write out the reaction on a separate sheet of paper, and then draw the structure of **enolate ion 1**.

- You do not have to consider stereochemistry.
- You do not have to explicitly draw H atoms.
- Do not include lone pairs in your answer. They will not be considered in the grading.
- Do not include counter-ions, e.g., Na^+ , I^- , in your answer.

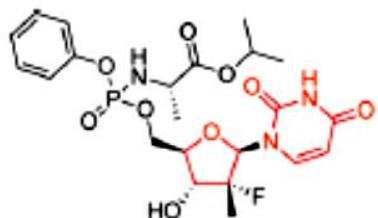
Brønsted acid-promoted synthesis of common heterocycles and related bio-active and functional molecules

Sudipta Ponra and K. C. Majumdar

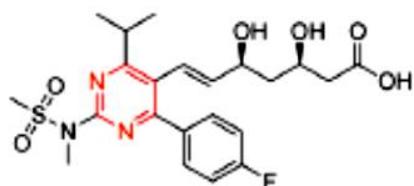
RSC Adv., 2016, 6, 37784-37922



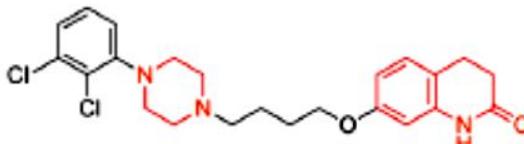
IMPORTANCIA DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS HETEROCÍCLICOS AROMÁTICOS



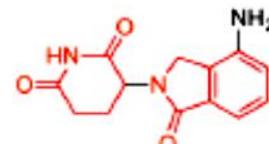
Sofosbuvir (Gilead Sciences)
rank: 2; sales: \$12.41B
Treats: hepatitis C



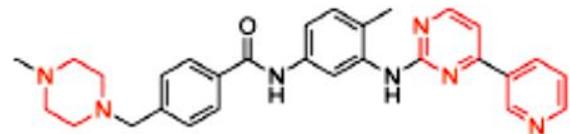
Rosuvastatin (Astra Zeneca)
rank: 10; sales: \$6.62B
Treats: high cholesterol



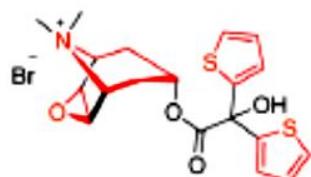
Aripiprazole (Otsuka)
rank: 1; \$6.42B
Treats: schizophrenia, bipolar disorder



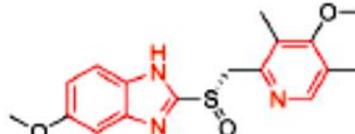
Lenalidomide (Celgene)
rank: 13; sales: \$4.98B
Treats: multiple myeloma



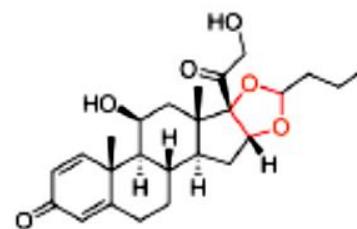
Imatinib (Novartis)
rank: 14; sales: \$4.75B
Treats: multiple cancers



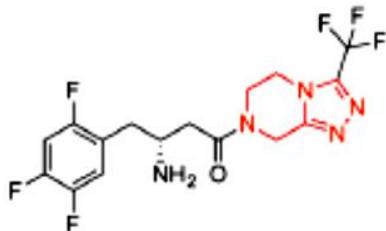
Tiotropium bromide (Boehringer-Ingelheim, Pfizer), rank: 15; sales: \$4.72B
Treats: chronic obstructive pulmonary disease



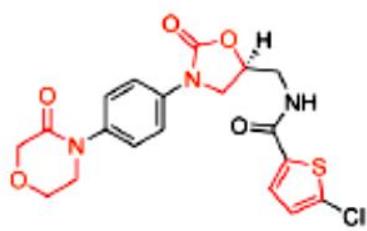
Esomeprazol (AstraZeneca)
rank: 18; sales: \$4.44B
Treats: dyspepsia, peptic ulcer disease, gastroesophageal reflux disease



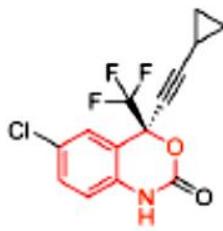
Budesonide (AstraZeneca)
rank: 19; sales: \$4.26B
Treats: asthma, chronic obstructive pulmonary disease



Sitagliptin (Merck)
rank: 22; sales: \$3.93B
Treats: diabetes mellitus type 2



Rivaroxaban (Bayer)
rank: 23; sales: \$3.68B
Treats: venous thromboembolism



Efavirenz/emtricitabine/tenofovir (Gilead Sciences)
rank: 24, 25; sales: \$3.52, 3.47B
Treats: HIV infection

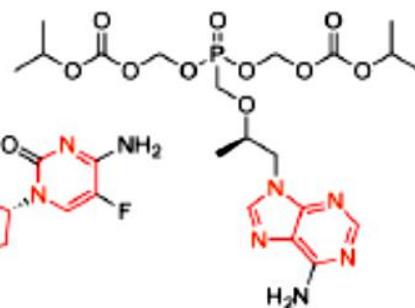
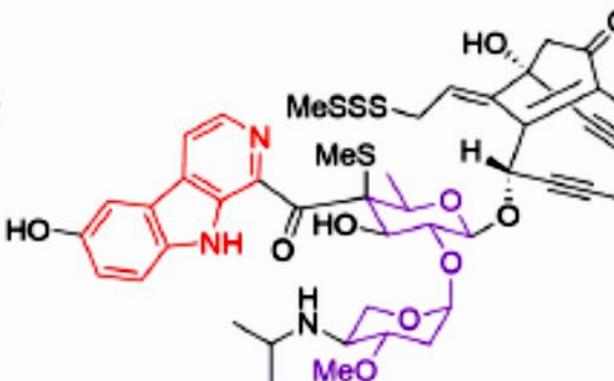


Figure 1. Top grossing pharmaceuticals (2014) containing heterocyclic moieties.



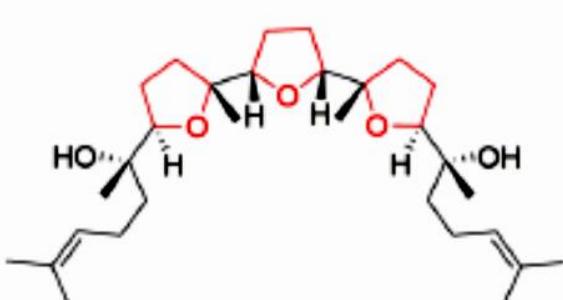
1 ($R = H$, verruculogen)
2 ($R = \text{prenyl}$, fumitremorgin A)



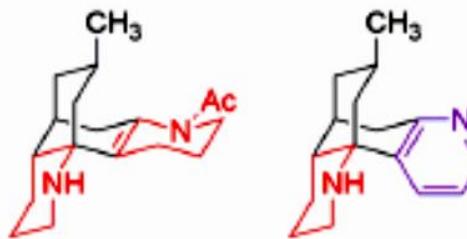
3 (shishijimicin A)



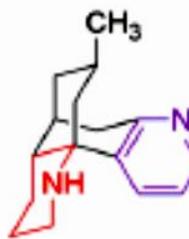
4 ((+)-MPC1001B)



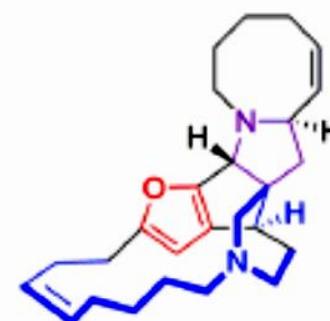
5 (teurilene)



6 ((+)-flabellidine)



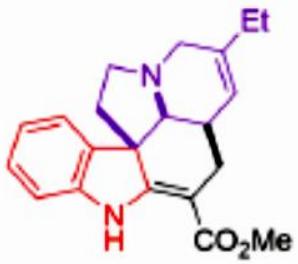
7 ((-)-lycodine)



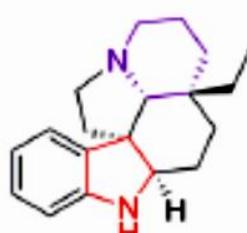
8 ((-)-nakadomarin A)



9 (neoxaline)



10 ((-)-pseudotabersonine)



11 ((+)-aspidospermidine)

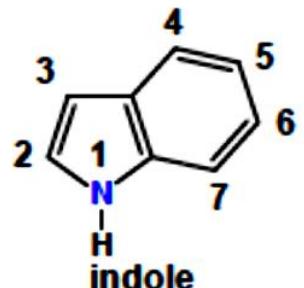
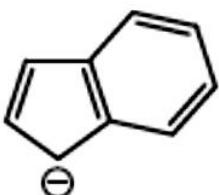
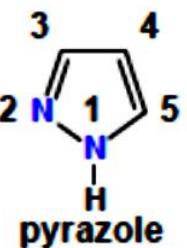
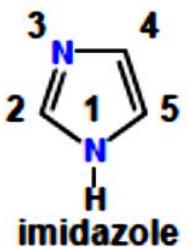
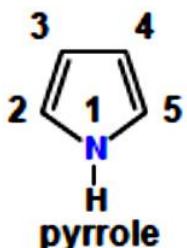
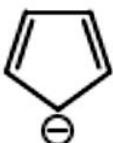


12 ((-)-strychnine)

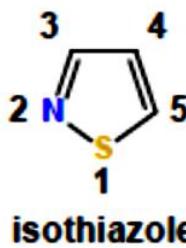
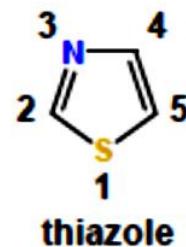
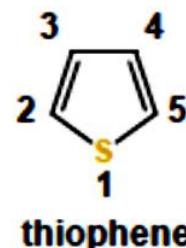
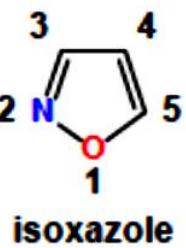
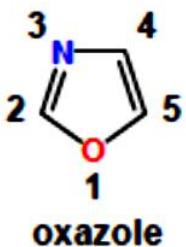
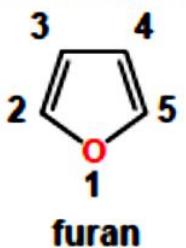
Figure 2. Selection of natural products featuring common scaffolds relevant in medicinal chemistry.

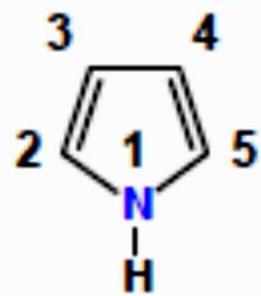
Classification – Aromatic Five-Membered

Isoelectronic carbocycle

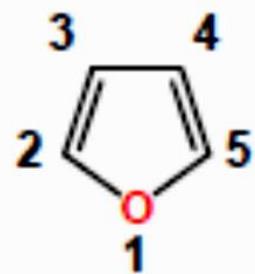


Heterocycles

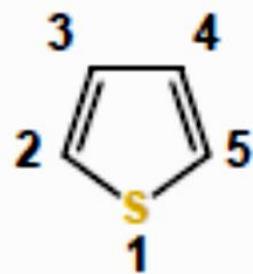




Pirrol

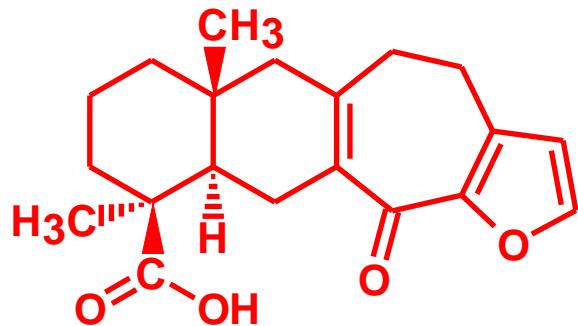


Furano



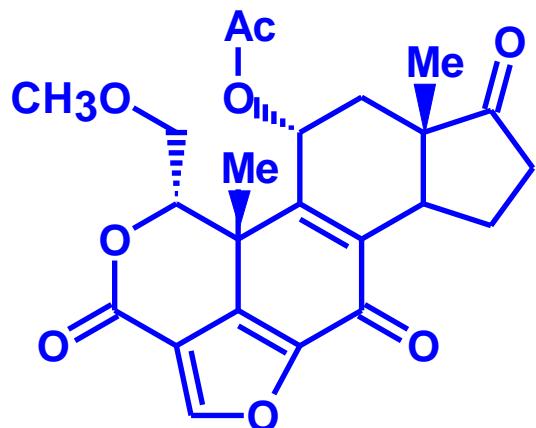
Tiofeno

DERIVADOS DEL FURANO. PRODUCTOS NATURALES



ÁCIDO HISPANOÍCO

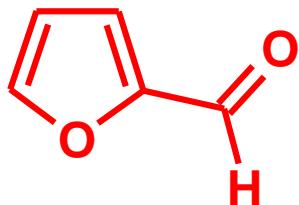
AISLADO DE LA *Ballota hispanica*, UNA PLANTA QUE CRECE EN ESPAÑA



WORTMANINA

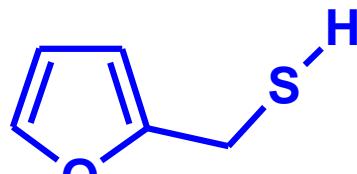
ANTIBIÓTICO, ANTIFUNGICIDA QUE SE OBTIENE DE LA *Penicillium wortmanni*

DERIVADOS DEL FURANO. PRODUCTOS NATURALES



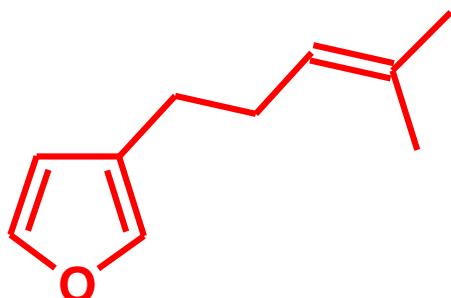
ALDEHÍDO DEL SALVADO (DEL LATÍN *FURFUR*, SALVADO)

FURFURAL



ES UNO DE LOS COMPUESTOS
RESPONSABLES DEL AROMA DEL CAFÉ
TOSTADO

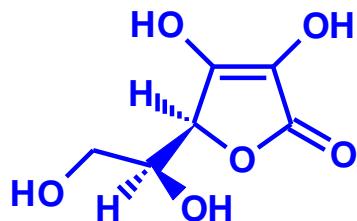
FURILTIOL



ES UNO DE LOS TERPENOIDES, UN
METABOLITO DE LAS PLANTAS

PERILENO

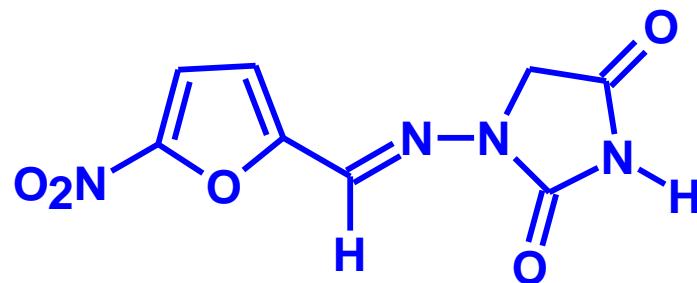
DERIVADOS DEL FURANO. PRODUCTOS NATURALES



ÁCIDO ASCÓRBICO
(VITAMINA C)

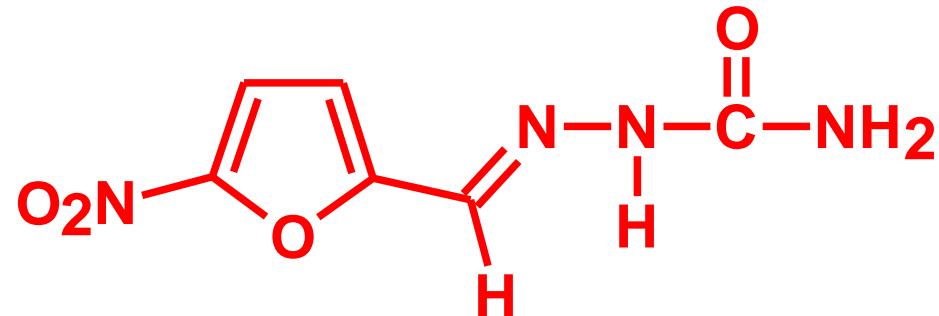
El enantiómero L (levógiro) de este ácido comúnmente se conoce como vitamina C. El nombre "ascórbico" proviene del prefijo *a-* ("sin") y del latín *scorbuticus* ("escorbuto"), procede de su propiedad de prevenir y curar el escorbuto.

DERIVADOS DEL FURANO. AGENTES MEDICINALES



NITROFURANTOÍNA

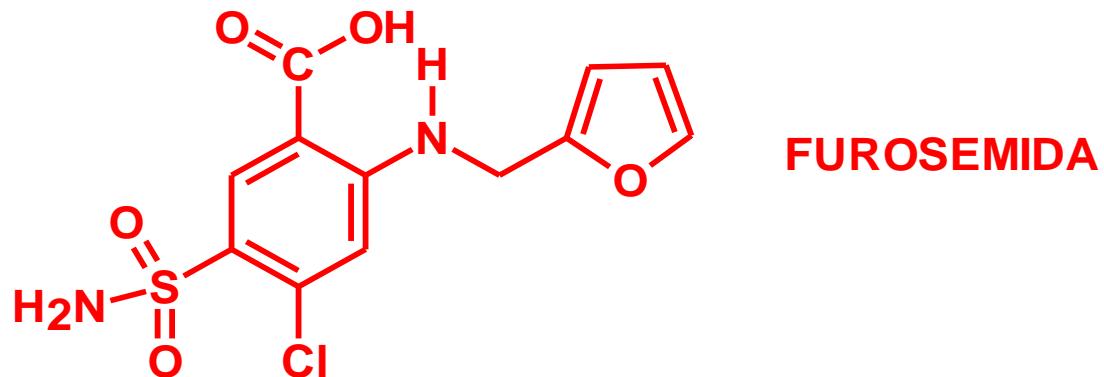
AGENTE
ANTIBACTERIAL
ESPECÍFICO PARA LAS
INFECCIONES DEL
TRACTO URINARIO



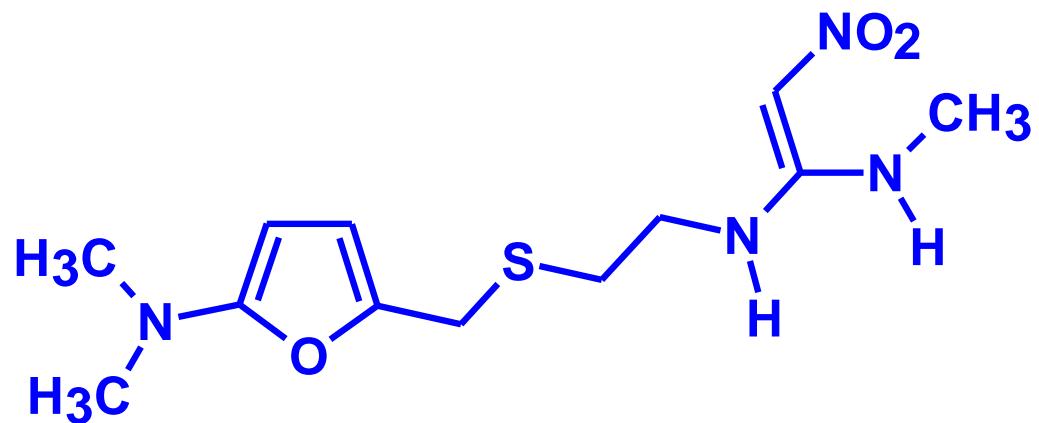
NITROFURAZONA

AGENTE
ANTIBACTERIAL

DERIVADOS DEL FURANO. AGENTES MEDICINALES



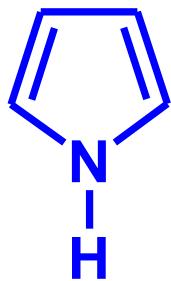
AGENTE DIURÉTICO
USADO EN LA FALLA
CONGESTIVA DEL
CORAZÓN



SE USA EN EL
TRATAMIENTO DE LA
ÚLCERA ESTOMACAL

RANITIDINA

PIRROL:



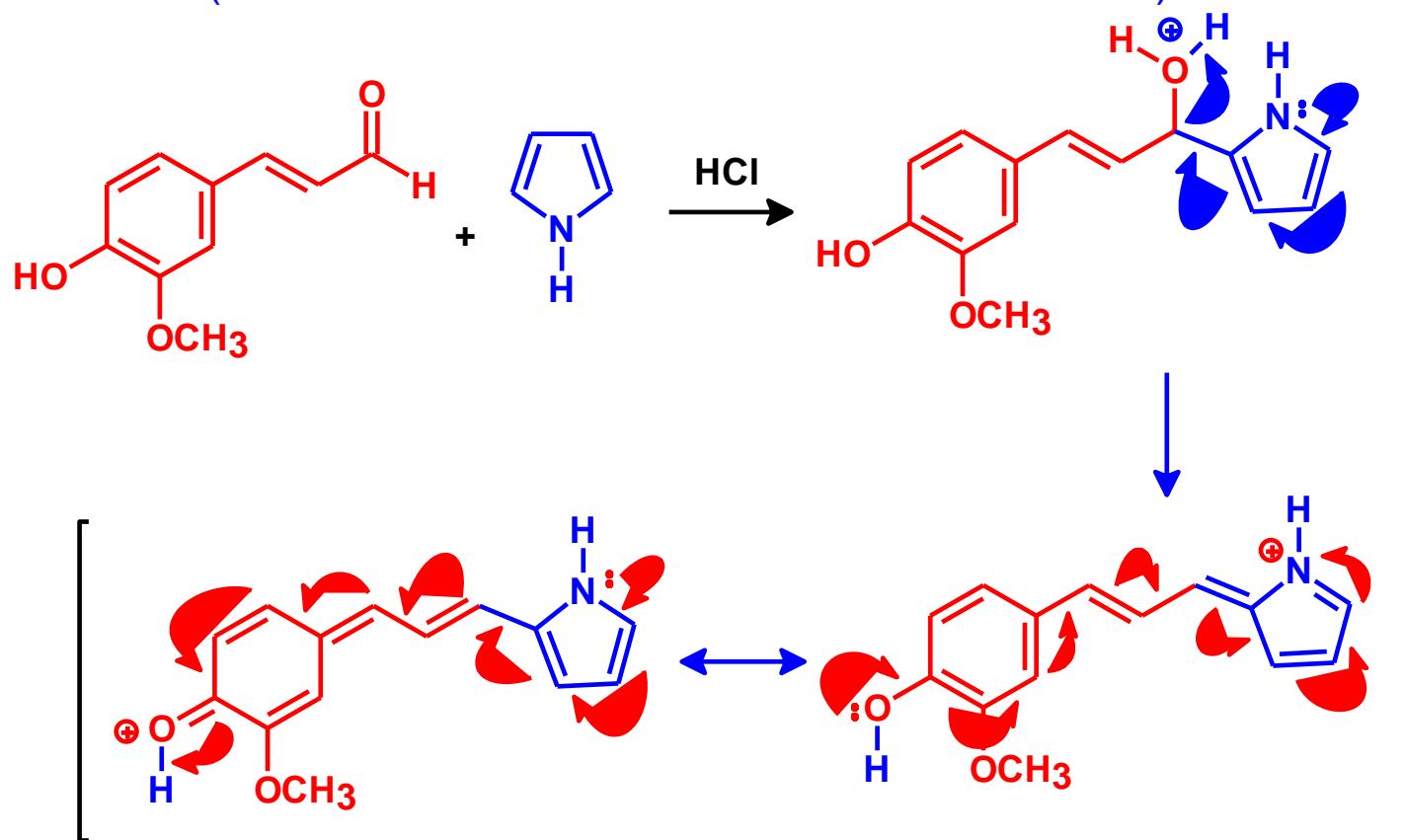
Se aisló por primera vez en 1857, de la pirólisis de huesos. La palabra deriva del griego *pŷr*, πῦρ, 'fuego', 'fiebre' *pyrr-* πυρρός gr. (adj.), 'de color fuego'

Neologismos que usan el lexema

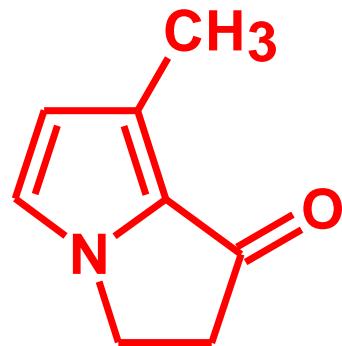
pirrol; pirrolina Lexemas que tienen la misma raíz *pyr(o)-* gr., 'fuego', 'fiebre'; *pyret(o)-* gr., 'fiebre'

PYROS: ROJO

(ASTILLA DE PINO IMPREGNADA CON HCl)



DERIVADOS DEL PIRROL. PRODUCTOS NATURALES



DANAIDONA

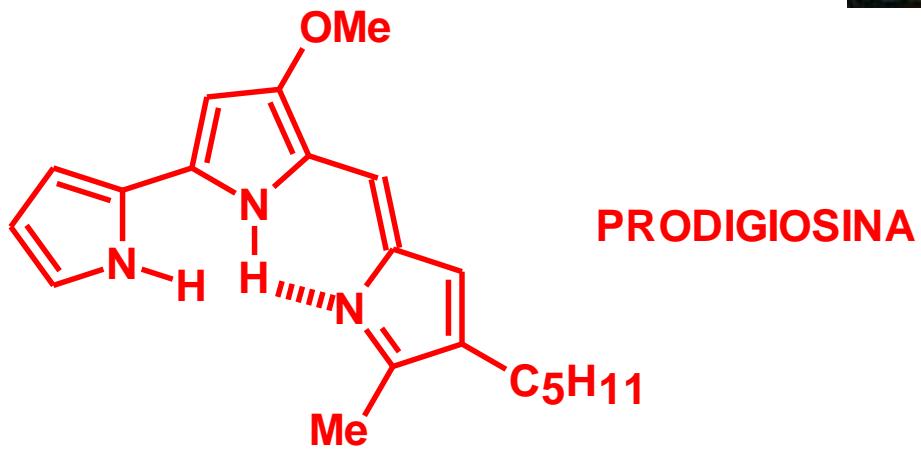
FEROMONA DE LA HEMBRA DE LA
MARIPOSA MONARCA, *Lycorea*
ceres ceres



DERIVADOS DEL PIRROL. PRODUCTOS NATURALES



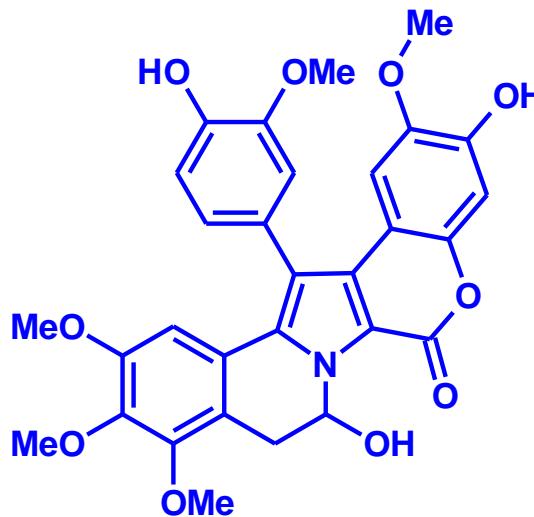
CORAL
INFECTADO CON
LA BACTERIA



PIGMENTO DE COLOR
ROJO SANGRE DE LA
BACTERIA *SERRATIA*
MARCESENS

ACTIVIDAD ANTIBACTERIAL
Y ANTIFUNGICIDA

DERIVADOS DEL PIRROL. PRODUCTOS NATURALES

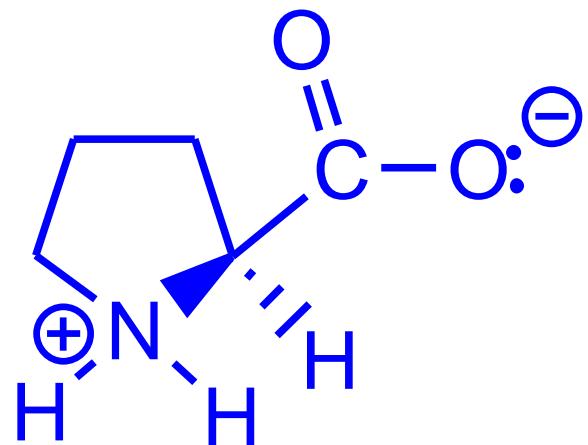


LAMELERINA A

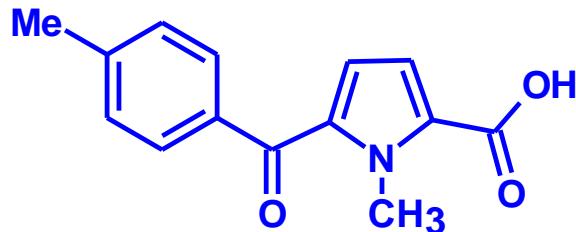
METABOLITO DE UN
MOLUSCO DEL PACÍFICO,
LAMELLARIA, sp.
ANTIBIÓTICO.
TRATAMIENTO CONTRA EL
CÁNCER

DERIVADOS DEL PIRROL. PRODUCTOS NATURALES

La prolina, es un aminóacido con un grupo amino secundario dentro de un anillo de cinco miembros, con el nitrógeno y el carbono α formando parte de la estructura cíclica

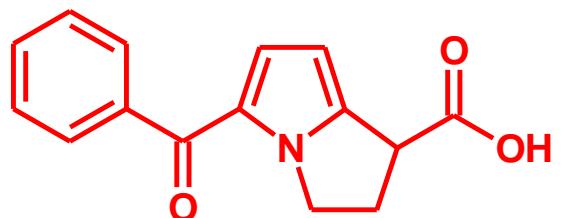


DERIVADOS DEL PIRROL. AGENTES MEDICINALES



TOLMETÍN

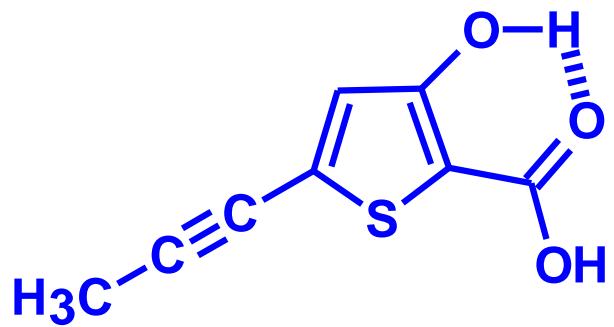
SE USA EN CLINICA COMO UN AGENTE ANTIINFLAMATORIO DE TIPO NO ESTEROIDAL MUY ÚTIL



CETOROLAC

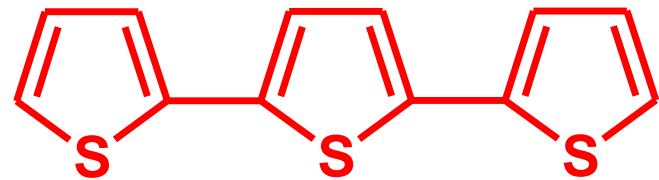
SE USA EN CLINICA COMO UN ANALGÉSICO NO ADICTIVO, MUY ÚTIL CON LA MISMA POTENCIA QUE LA MORFINA

DERIVADOS DEL TIOFENO. PRODUCTOS NATURALES

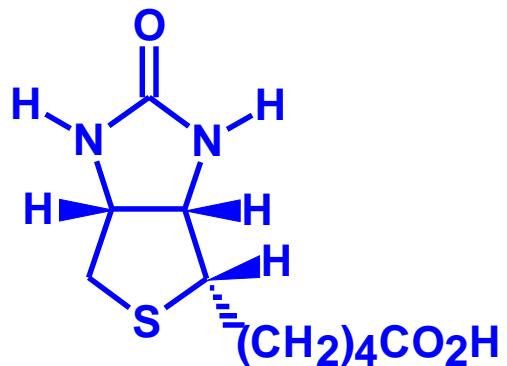


SE ENCUENTRA EN LA
RAÍCES DE LA *Artemisa
arborescens L.*

DERIVADOS DEL TIOFENO. PRODUCTOS NATURALES



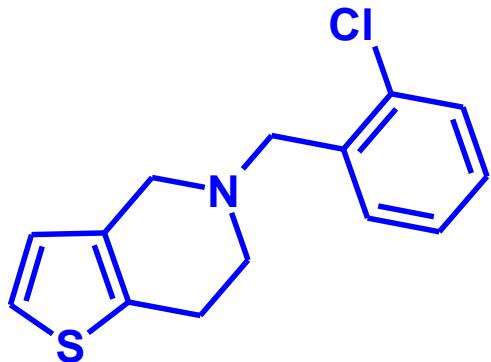
SE ENCUENTRA EN LA
CALÉNDULA COMÚN,
Tagetes erecta L.



BIOTINA
(VITAMINA H)

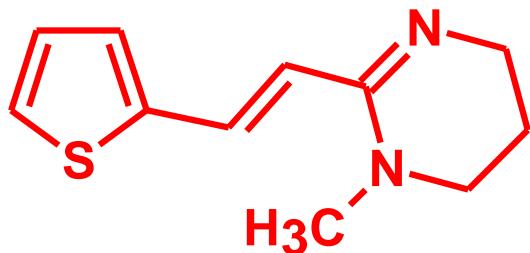
La **biotina**, **vitamina H**, **vitamina B7** y a veces también llamada **vitamina B8**; es una vitamina estable al calor, soluble en agua, alcohol y susceptible a la oxidación, interviene en el metabolismo de los hidratos de carbono, grasas, aminoácidos y purinas. La biotina es importante como un cofactor en la catálisis de reacciones metabólicas esenciales para sintetizar ácidos grasos, en la gluconeogénesis y en el metabolismo de la leucina.

DERIVADOS DEL TIOFENO. AGENTES MEDICINALES



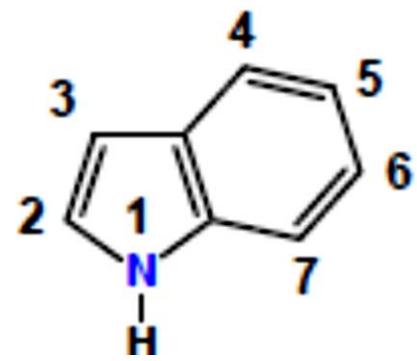
TICLOPIDINA

CLINICAMENTE ES UN IMPORTANTE INHIBIDOR DE LA AGREGACIÓN DE PLAQUETAS DE LA SANGRE Y ES UN AGENTE ANTITROMBÓTICO, ESPECIALMENTE EN PACIENTES SENSIBLES A LA ASPIRINA



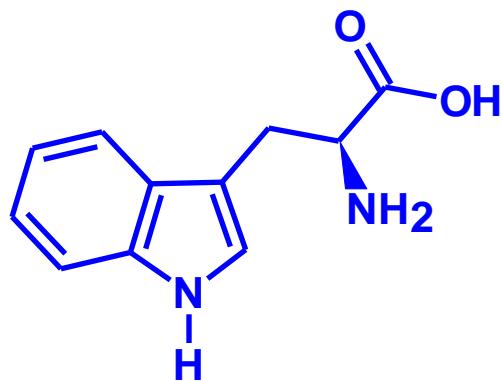
PIRANTEL

ANTIHELMINTICO, SE USA EN ESPECIAL CONTRA LOS NEMÁTODOS EN LOS ANIMALES



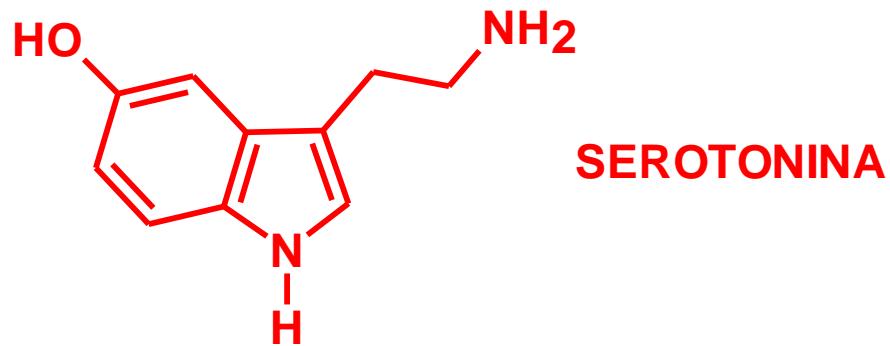
Indol

DERIVADOS DEL INDOL. PRODUCTOS NATURALES



TRIPTOFANO

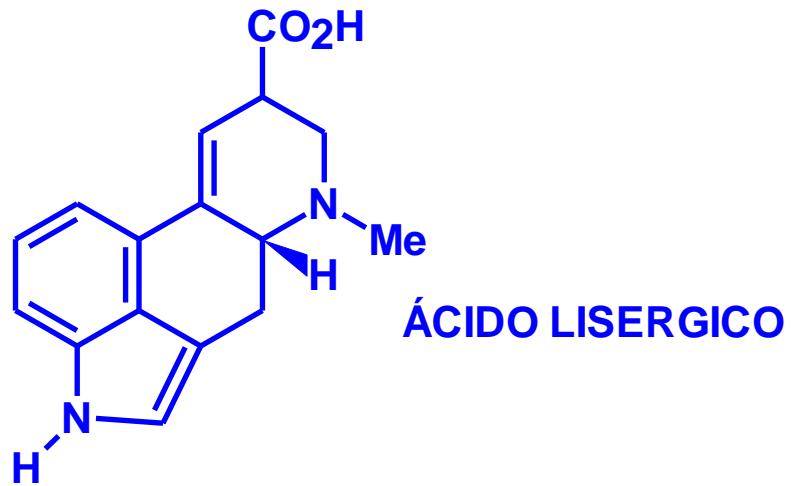
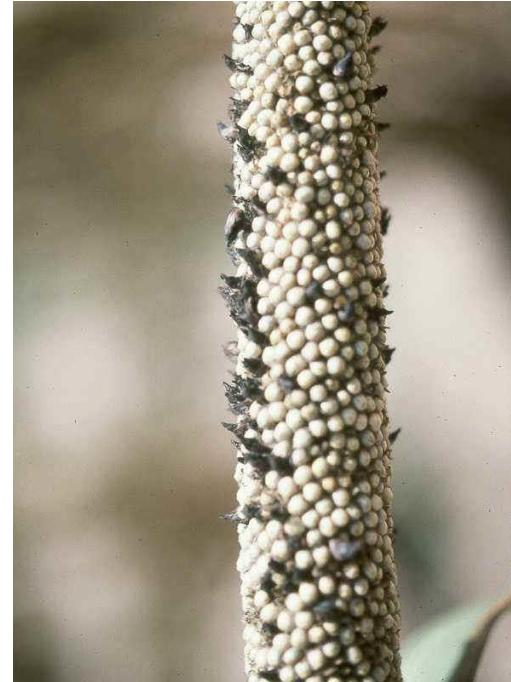
AMINOÁCIDO ESENCIAL,
PRECURSOR DE LA
SEROTONINA



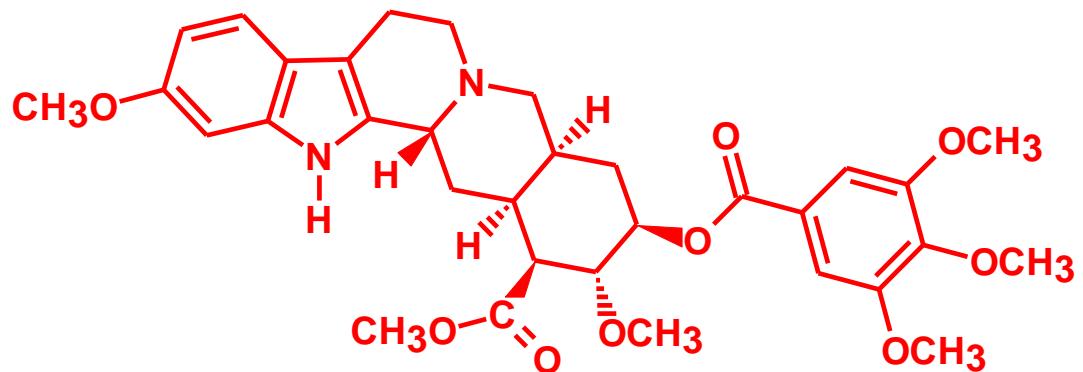
SEROTONINA

SE ENCUENTRA EN LOS
TEJIDOS Y FLUÍDOS DE
LOS VERTEBRADOS E
INVERTEBRADOS. ESTA
INVOLUCRADA EN
PROCESOS FISIOLÓGICOS
CENTRALES Y
PERIFÉRICOS

DERIVADOS DEL INDOL. PRODUCTOS NATURALES



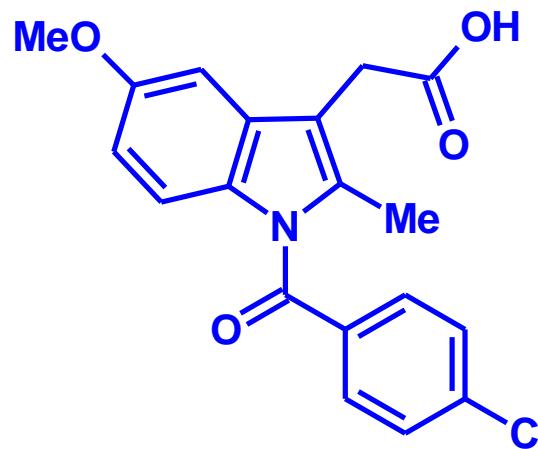
PRODUCTO DE LA
RUPTURA ALCALINA DE
LOS ALCALOIDES DEL *Ergot*



RESERPINA

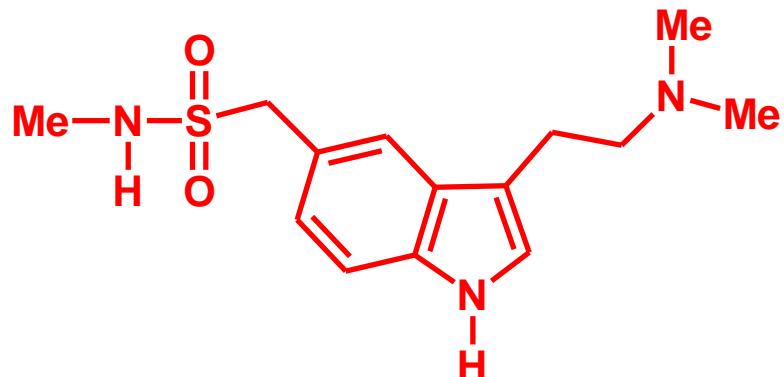
AISLADA DE LAS RAÍCES
DE *Rauwolfia Serpentina*.
TIENE ACTIVIDAD
HIPOTENSIVA Y
TRANQUILIZANTE

DERIVADOS DEL INDOL. AGENTES MEDICINALES



UNA PODEROZO INHIBIDOR DE LA CICLOOXYGENASA. QUE SE USA COMO AGENTE ANTIINFLAMATORIO

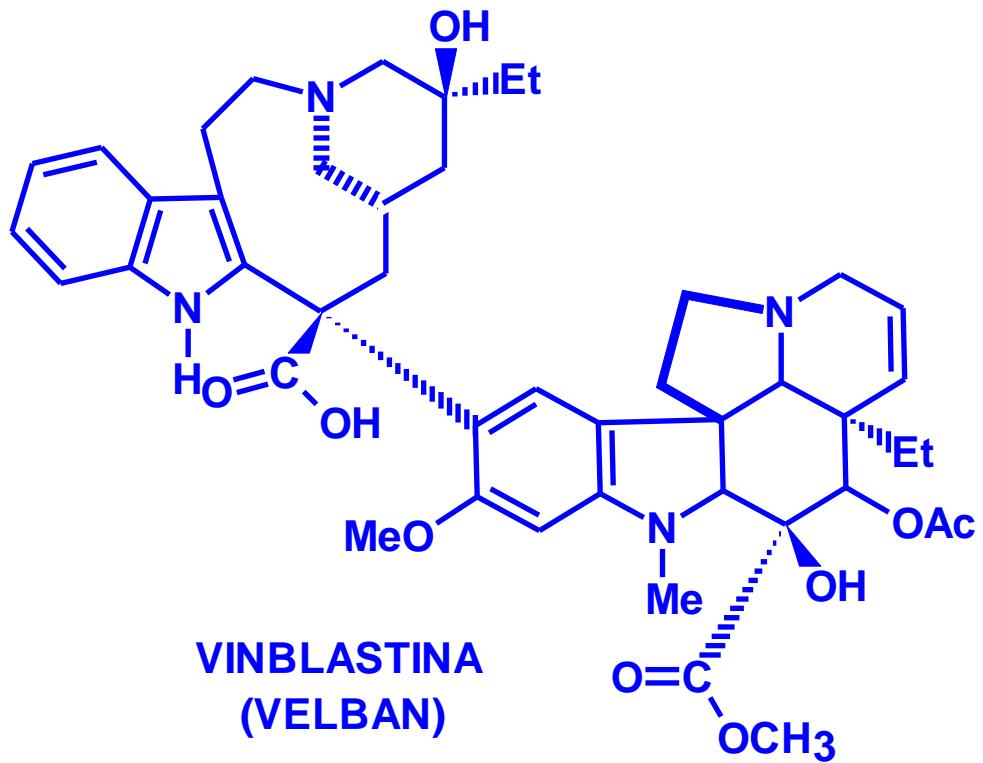
INDOMETACINA



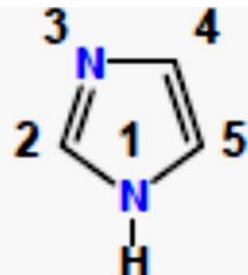
SUMATRIPTANO
(IMITREX)

ANTAGONISTA DEL RECEPTOR SELECTIVO DEL 5HT₁, EL CUAL SE USA PARA TRATAR LOS DOLORES DE CABEZA OCASIONADOS POR LA MIGRAÑA

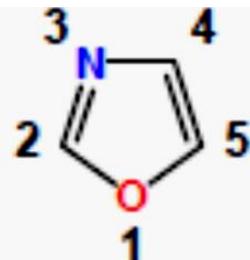
DERIVADOS DEL INDOL. AGENTES MEDICINALES



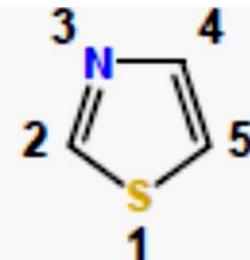
AISLADA DE LA *Vinca rosea*.
AGENTE ANTICANCER
ESPECIALMENTE EFECTIVO
PARA EL TRATAMIENTO DE LA
ENFERMEDAD DE HODGKIN
(ETAPAS III y IV), LIMFOCITICA,
LUMFOMA, ETC.



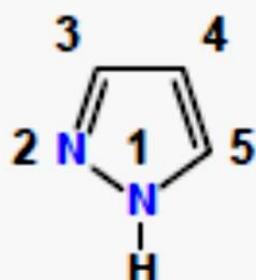
Imidazol



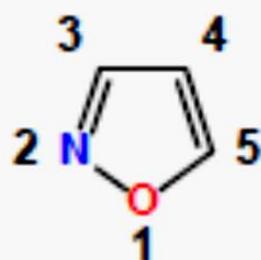
Oxazol



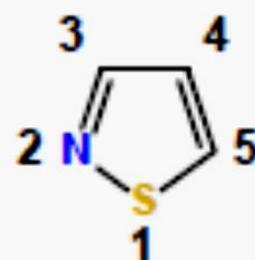
Tiazol



Pirazol

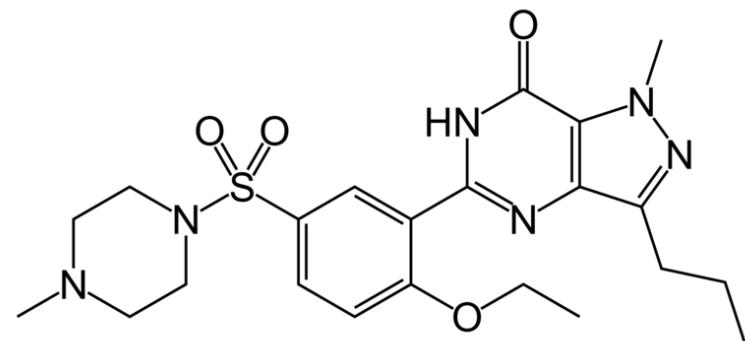
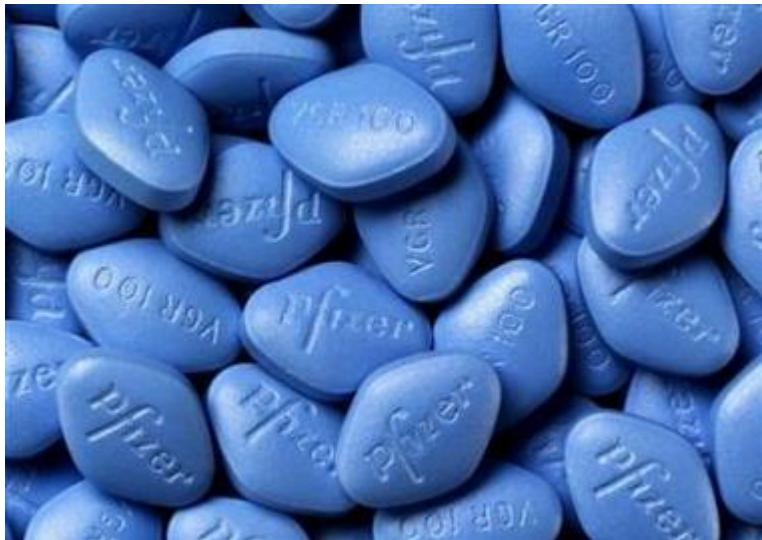


Isoxazol



Isotiazol

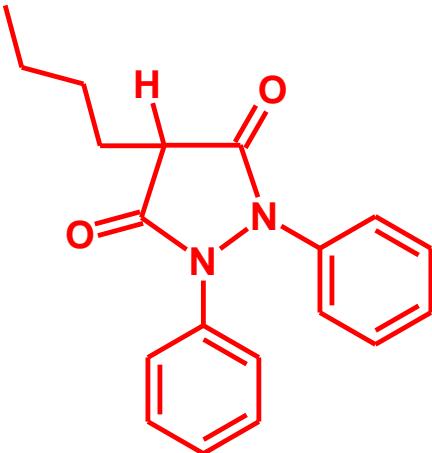
DERIVADOS DEL PIRAZOL. AGENTES MEDICINALES



CITRATO DE SILDENAFIL
VIAGRA
TRATAMIENTO DE LA
DISFUNCIÓN ERECTIL

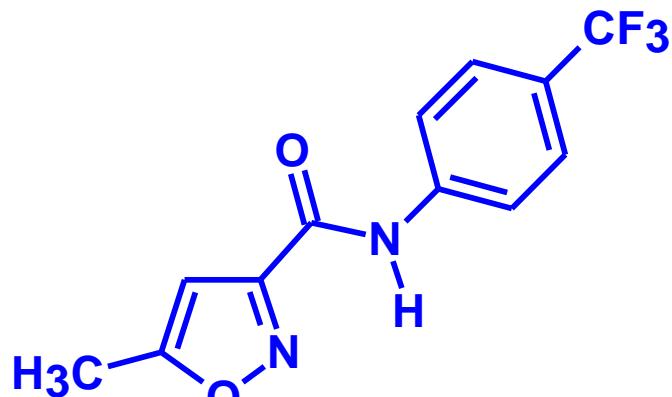


DERIVADOS DE AZOLES-1,2. AGENTES MEDICINALES



FENILBUTAZONA

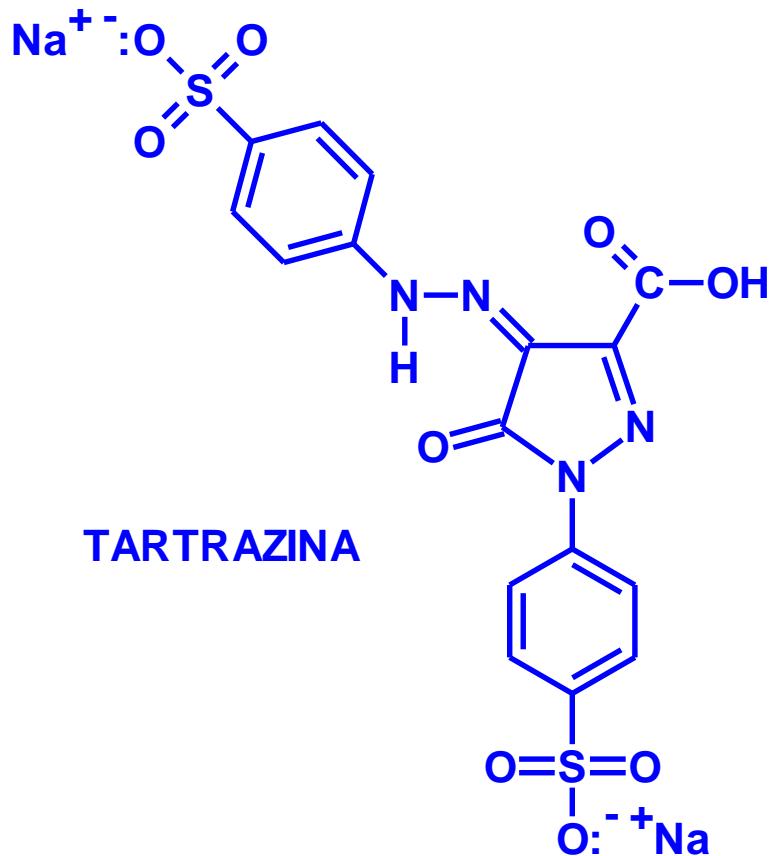
SE HA UTILIZADO EN EL TRATAMIENTO DE LA ARTRITIS SEVERA, QUE LA HAN PADECIDO PERSONAJES COMO CASANOVA, GOETHE Y LUTERO



LEFLUNOMIDA

SE HA UTILIZADO EN EL DESARROLLO DE LA TERAPIA PARA ENFERMEDADES AUTOINMUNES COMO LA ARTRITIS REUMATOIDE

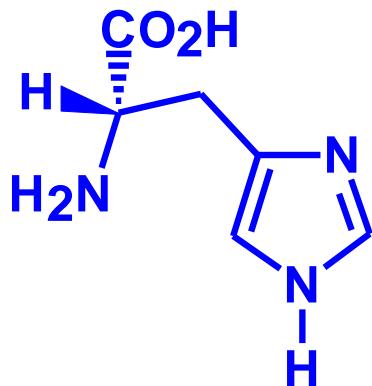
DERIVADOS DE AZOLES-1,2. AGENTES MEDICINALES



COLORANTE UTILIZADO
EN LA INDUSTRIA
ALIMENTICIA (AMARILLO)

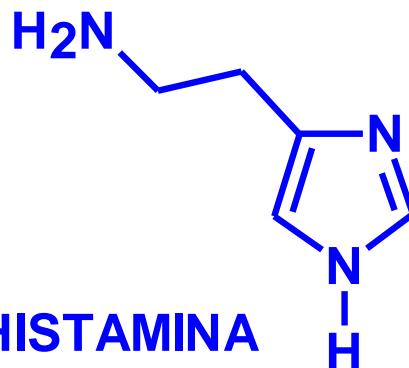
DERIVADOS DE AZOLES-1,3

IMIDAZOL. PRODUCTOS NATURALES



ES UN AMINOÁCIDO ESENCIAL DE TIPO BÁSICO QUE ESTA INVOLUCRADO EN LAS REACCIONES DE TRANSFERENCIA DE PROTÓN (EQUILIBRIOS ÁCIDO-BASE)

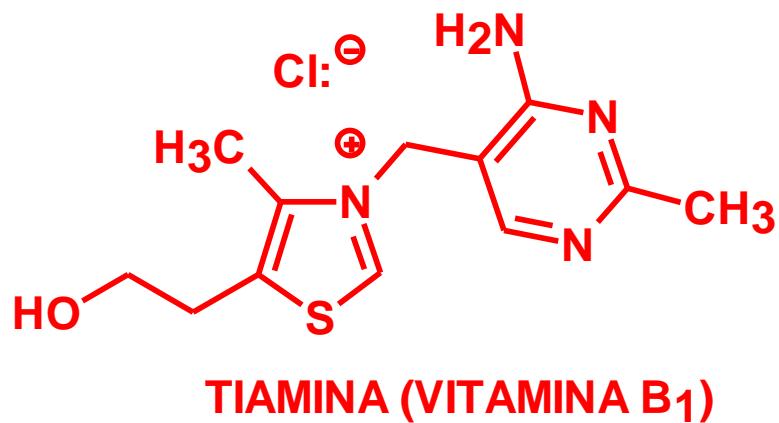
HISTIDINA



ES UNA HORMONA, QUE ACTÚA COMO UN VASODILATADOR Y UN FACTOR IMPORTANTE EN LAS REACCIONES ALÉRGICAS COMO LA FIEBRE

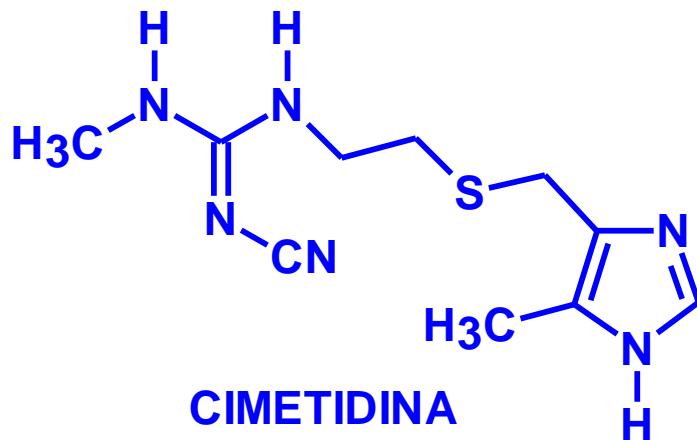
HISTAMINA

DERIVADOS DEL IMIDAZOL. PRODUCTOS NATURALES

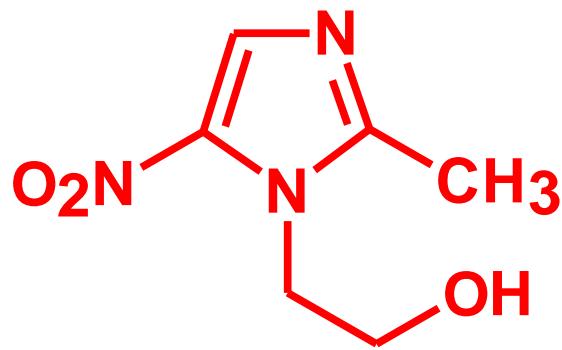


TIENE UNA SAL DE TIAZOLIO LA CUAL ES EL CENTRO QUÍMICAMENTE ACTIVO EN ESTA COENZIMA

DERIVADOS DE AZOLES-1,3. AGENTES MEDICINALES



SE UTILIZA EN EL TRATAMIENTO DE
ÚLCERAS PÉPTICAS

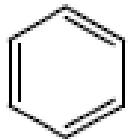


METRINIDAZOL

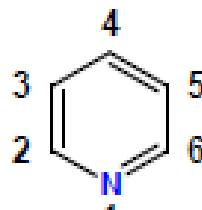
SE UTILIZA COMO ANTIPROTOZOARIO
PARA EL TRATAMIENTO DE LA
DISENTERIA POR AMIBAS

Classification – Aromatic Six-Membered

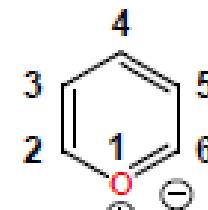
Isoelectronic carbocycle



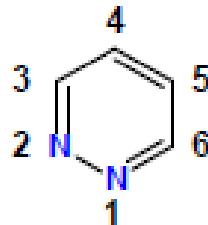
Heterocycles



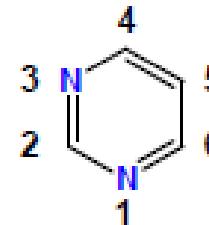
pyridine



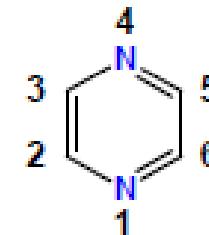
pyrlyium



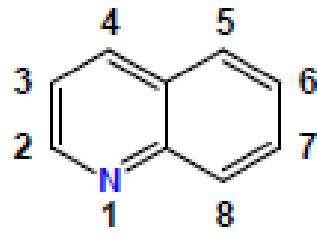
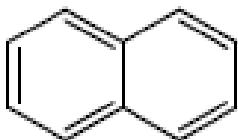
pyridazine



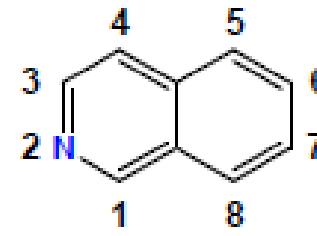
pyrimidine



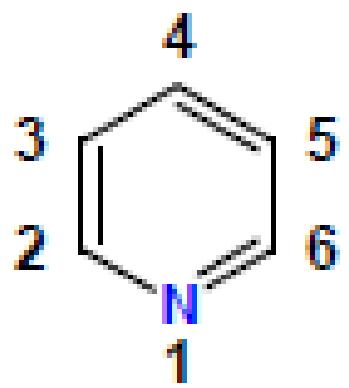
pyrazine



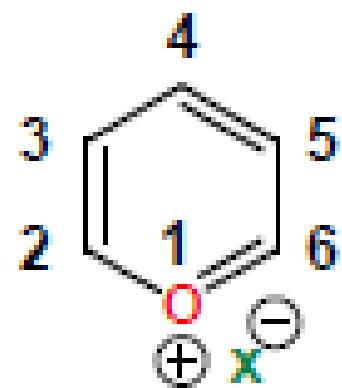
quinoline



isoquinoline

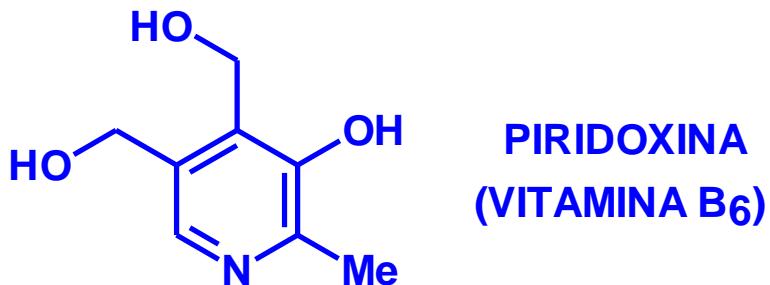


Piridina



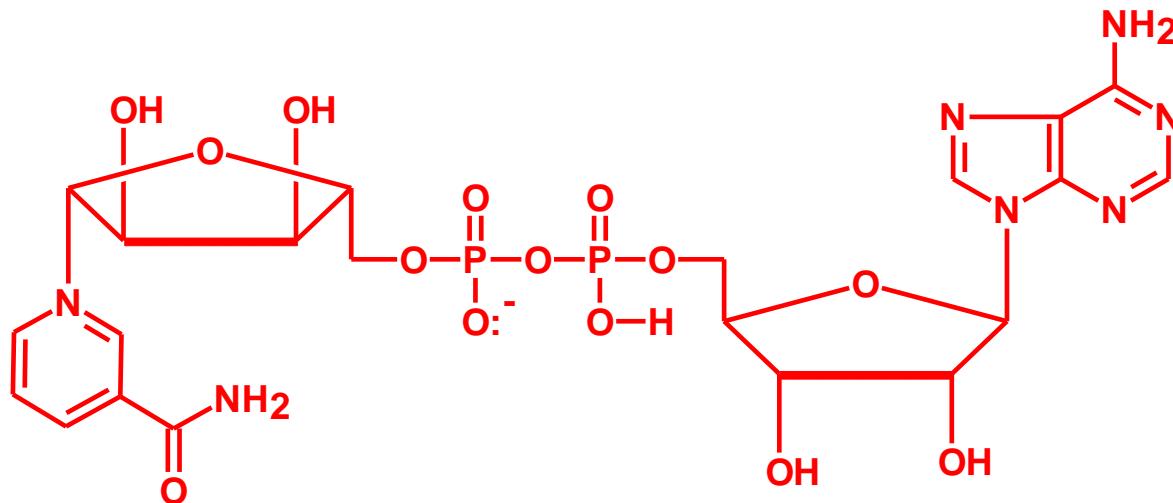
Sales de pirilio

DERIVADOS DE LA PIRIDINA. PRODUCTOS NATURALES



VITAMINA ESENCIAL QUE SE ENCUENTRA EN MUCHOS ALIMENTOS, ES EL PRECURSOR *in vivo* DEL 5-FOSFATO DE PIRIDOXAL, EL CUAL ES UN GRUPO PROSTÉTICO PARA TODAS LAS TRANSAMINACIONES

DERIVADOS DE LA PIRIDINA. PRODUCTOS NATURALES



NAD

DINUCLEÓTIDO DE LA NICOTINAMIDA-ADENINA

ES UNA DE LAS FORMAS BIOLÓGICAMENTE ACTIVAS DEL ÁCIDO NICOTÍNICO. SIRVE COMO UNA COENZIMA PARA LAS DESHIDROGENASAS, EN ESPECIAL EN LA DESHIDROGENACIÓN DE ALCOHOLES PRIMARIOS Y SECUNDARIOS

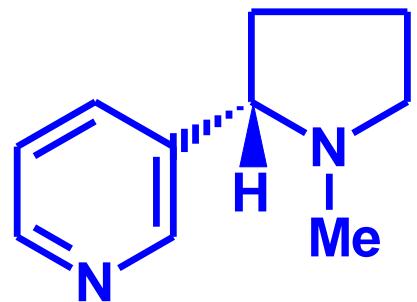
DERIVADOS DE LA PIRIDINA. PRODUCTOS NATURALES



NICOTINIUM TABACUM



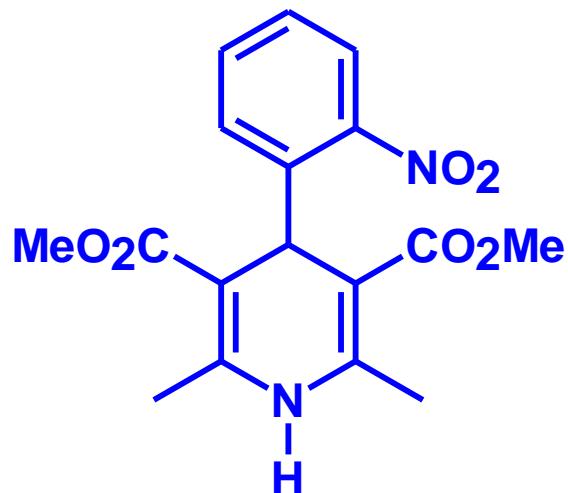
NICOTINIUM RUSTICA



ALCALOIDE, PRINCIPIO ADICTIVO QUE SE
ENCUENTRA EN EL *NICOTINIUM TABACUM* Y
EL LA *NICOTINIUM RUSTICA*

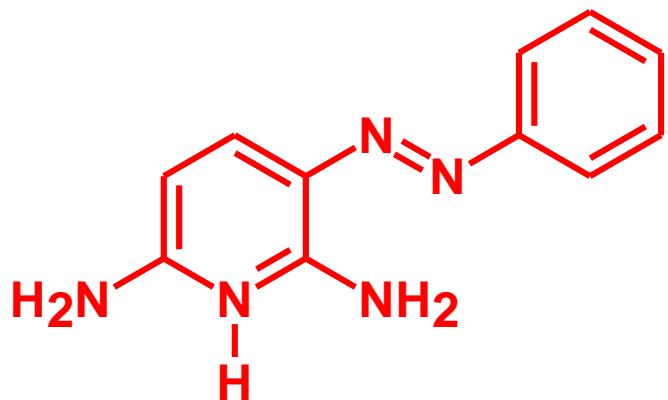
(S)-(-)-NICOTINA

DERIVADOS DE LA PIRIDINA. AGENTES MEDICINALES



NIFEDIPINA

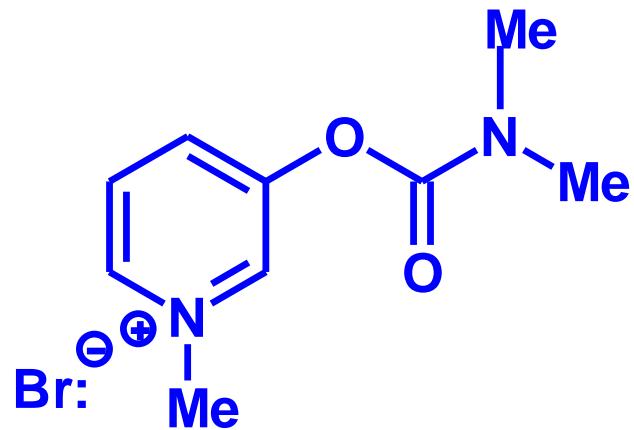
ANTAGONISTA DEL CALCIO QUE SE USA COMO ANTIANGINAL Y AGENTE ANTIHIPERTENSIVO



PIRIDINIO

ANALGÉSICO PARA EL TRACTO URINARIO

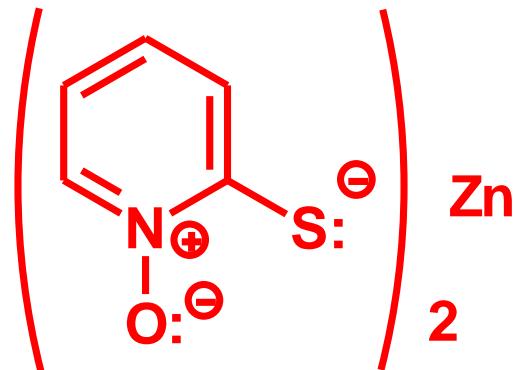
DERIVADOS DE LA PIRIDINA. AGENTES MEDICINALES



BROMURO DE PIRIDOSTIGMINA

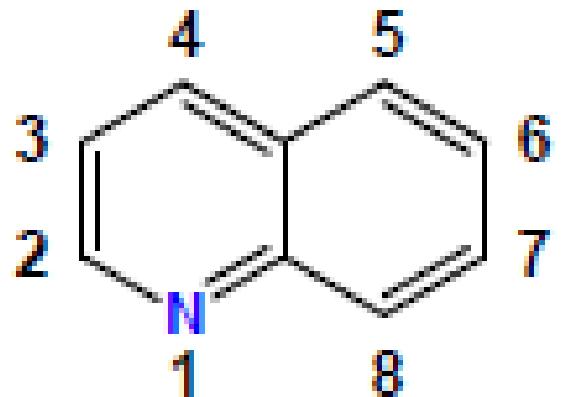
AGENTE COLINERGICO USADO EN EL TRATAMIENTO DE LA
Myasthenia gravis (DEBILIDAD PROGRESIVA DE LOS MÚSCULOS
VOLUNTARIOS)

DERIVADOS DE LA PIRIDINA. AGENTES MEDICINALES

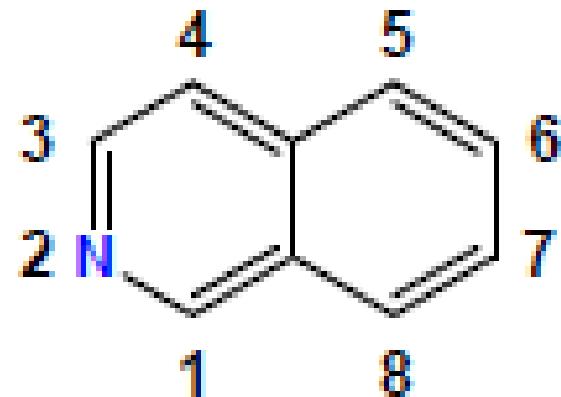


PIRITIONA DE ZINC

AGENTE ANTICASPA (e.g. EN HEAD AND SHOULDERS)

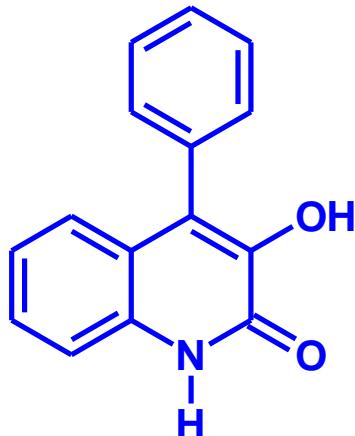


Quinolina



Isoquinolina

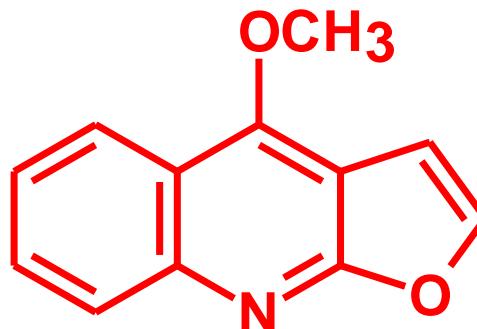
DERIVADOS DE LA QUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES



VIRIDICATINA



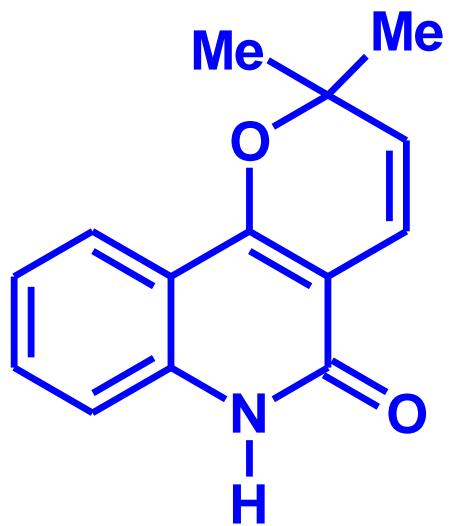
ANTIBIÓTICO QUE SE AISLA DEL *Penicillium veridicum*



DICTAMINA

SE AISLA DE LAS RAÍCES DE *Dictamnus albus*

DERIVADOS DE LA QUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES

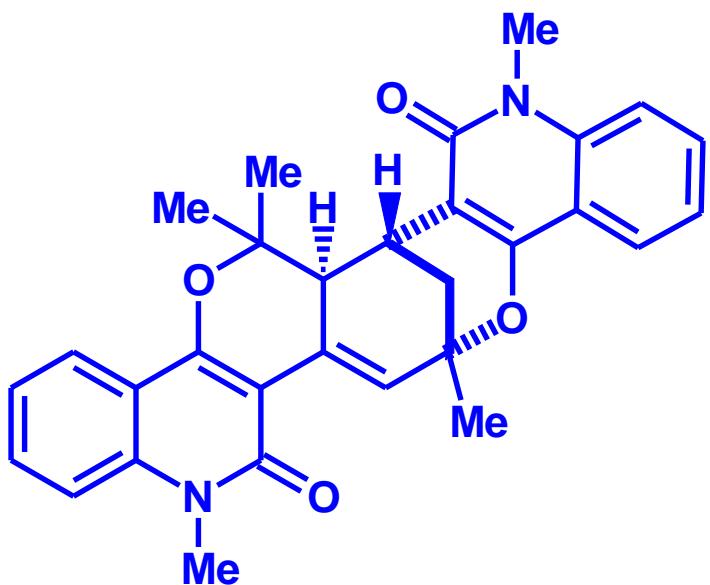


FLINDERSINA

SE AISLA DE LA CORTEZA DE LA *Flindersia australis*



DERIVADOS DE LA QUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES

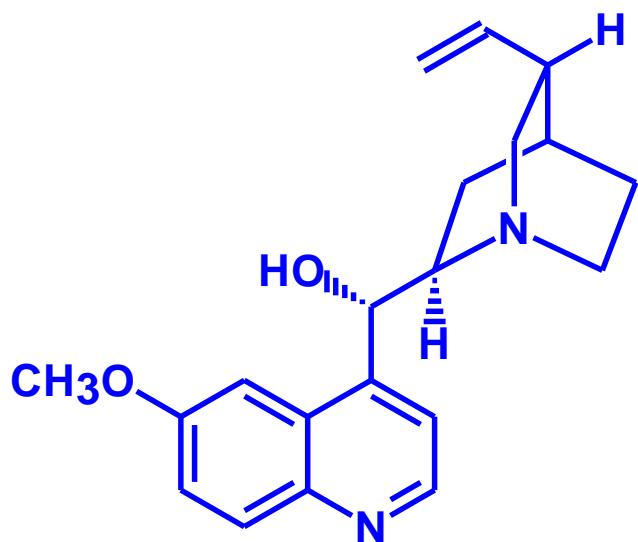


SE AISLA DE LA CORTEZA INTERNA DEL
ÁRBOL BRASILEÑO PAU AMARELO (PALO
AMARILLO) (*Euxylophona paraensis*)

PARAENSIDIMERINA E



DERIVADOS DE LA QUINOLINA. AGENTES MEDICINALES

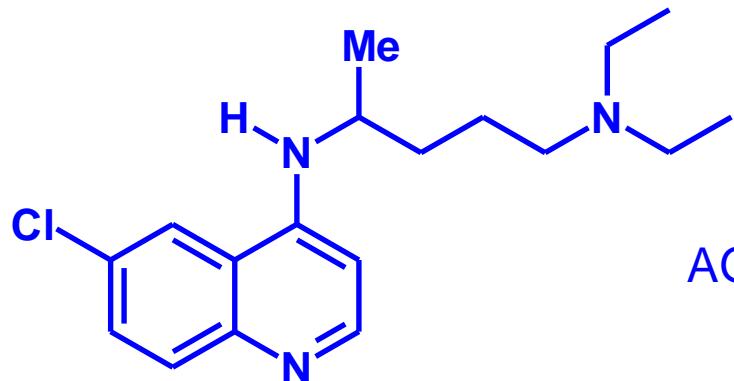


QUINIDINA

SE AISLA DE LA CORTEZA DE VARIAS ESPECIES DE CINCONA. ES EL ISÓMERO DEXTRORROTORARIO DE LA QUININA. TIENE UNA POTENTE ACTIVIDAD ANTIMALÁRICA PERO SU USO PRINCIPAL ES COMO UN AGENTE ANTIARRITMICO

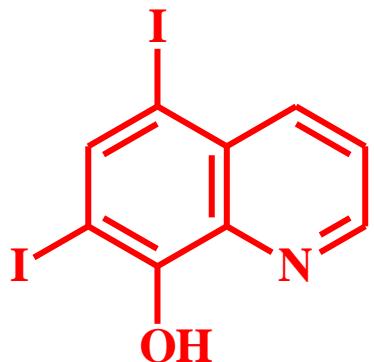


DERIVADOS DE LA QUINOLINA. AGENTES MEDICINALES



AGENTE ANTIAMEBICO Y ANTIMALÁRICO

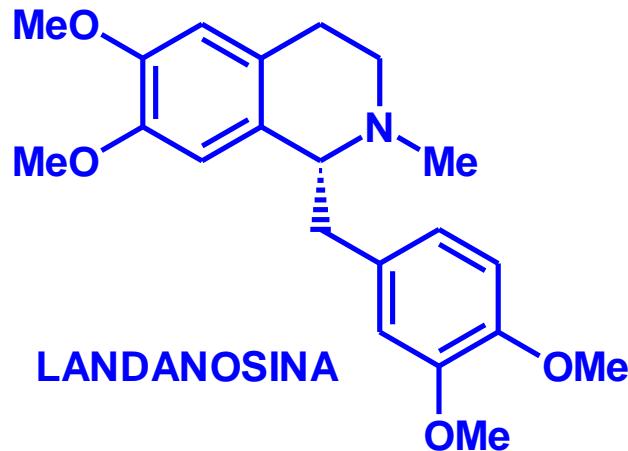
CLOROQUINA



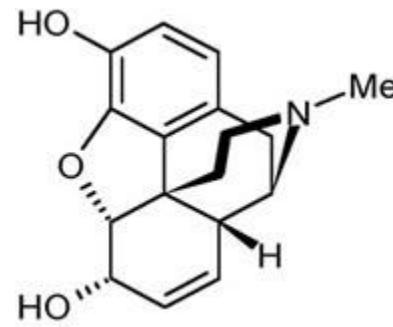
AGENTE ANTIAMEBICO

DIYODOQUINA

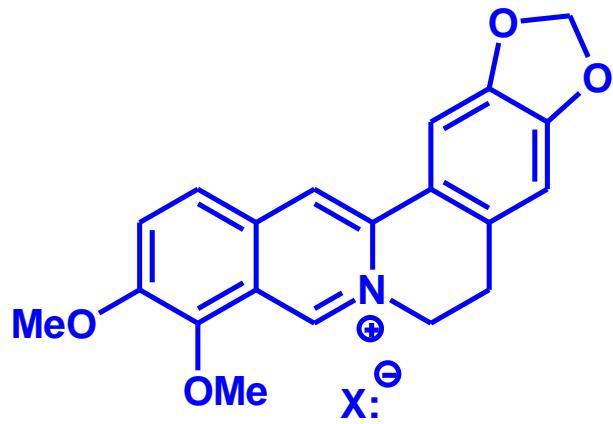
DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES



SE AISLA DE LAS AGUAS MADRES
DURANTE LA EXTRACCIÓN DE LA
MORFINA



DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES

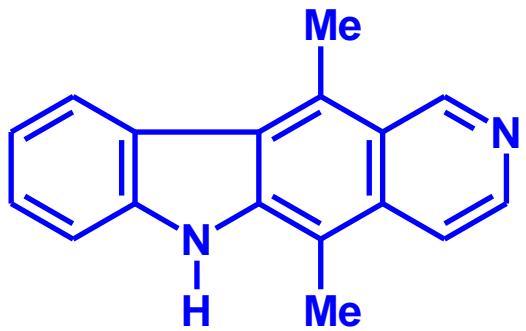


BARBERINA

SE AISLA DE LA *Hydrastis canadensis*

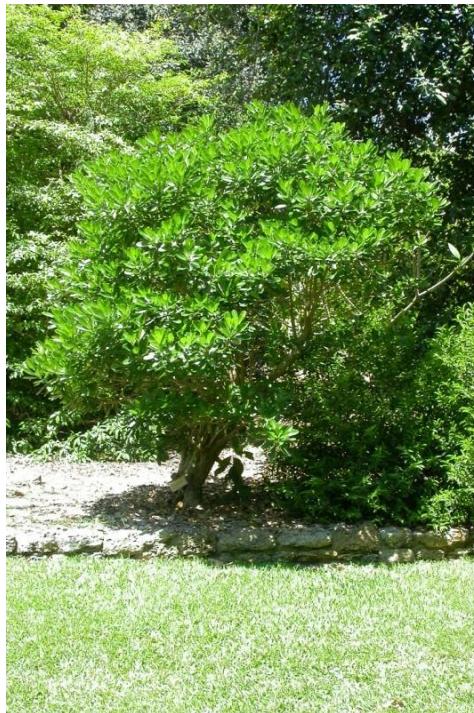


DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES

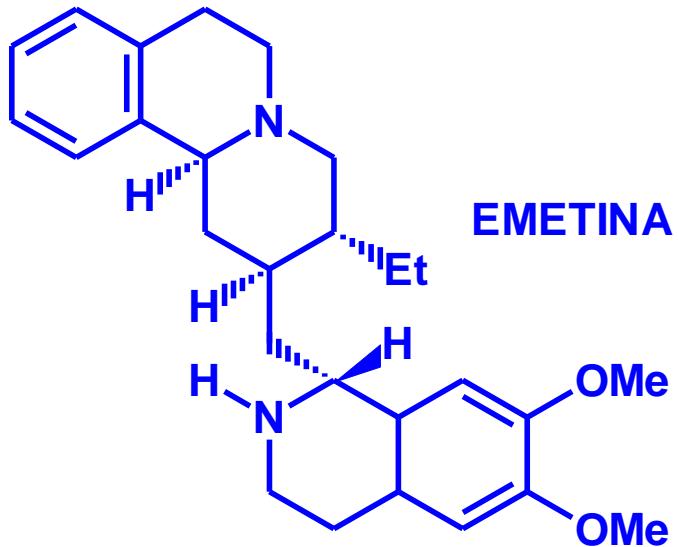


ELIPTICINA

SE AISLA DE LA OCHROSIA ELLIPTICA



DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. PRODUCTOS NATURALES



Ipecac
(AMERICANA)

ALCALOIDE PRINCIPAL DE LA IPECAC. ES USUAL OBTENERLA DE LA *Uraqopa ipecacuanha*

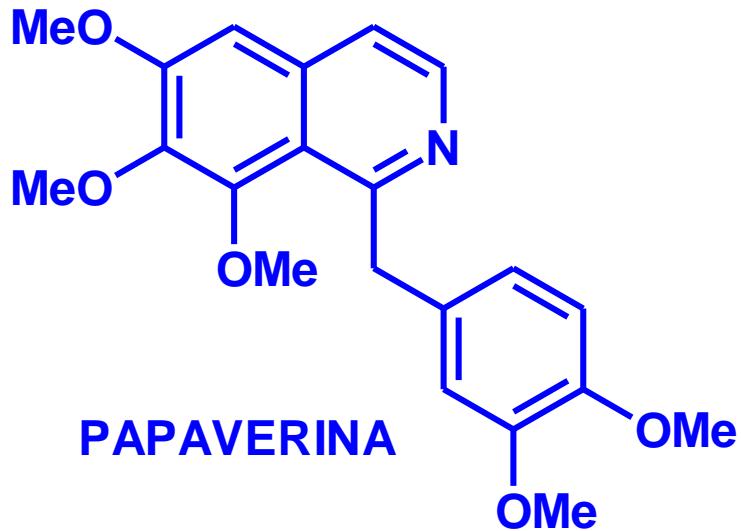


Uraqopa ipecacuanha europea

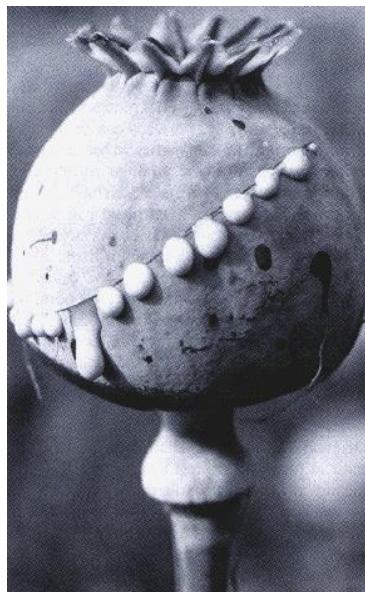


Frutos do cavalho

DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. AGENTES MEDICINALES

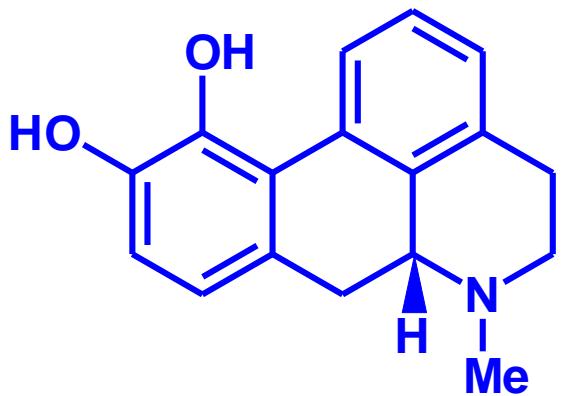


SE AISLA DE LA *Papaver somniferum*. ES USUAL ENCONTRARLA EN EL OPIO.
RELAJANTE DEL MÚSCULO LISO



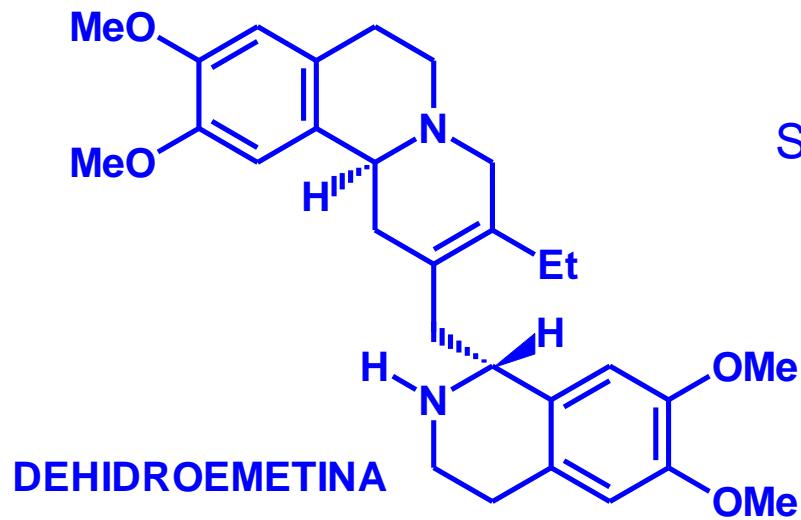
PAPAVER SOMNIFERUM

DERIVADOS DE LA ISOQUINOLINA. AGENTES MEDICINALES



SE USA COMO UN EMÉTICO

APOMORFINA



SE USA COMO UN AGENTE ANTIAMÉBICO

DEHIDROEMETINA

NOMENCLATURA

COMPUESTOS
ORGÁNICOS
CÍCLICOS

COMPUESTOS CARBOCÍCLICOS: solo contienen átomos de carbono en sus anillos

COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS: contienen otros elementos distintos del carbono (HETEROÁTOMOS) en sus anillos

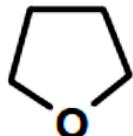
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS
según el número de anillos

MONOCÍCLICOS
POLICÍCLICOS

COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS
según su estructura

AROMÁTICOS
ALICÍCLICOS

THF



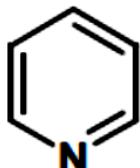
ALICÍCLICOS

Oxirano



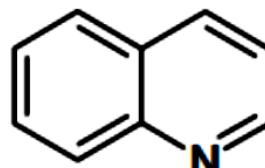
MONOCÍCLICOS

Piridina



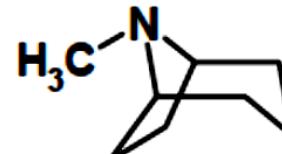
AROMÁTICO

Quinolina



AROMÁTICO

Tropano



ALICÍCLICO
BICÍCLICOS

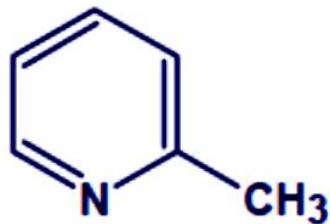
COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS

Nomenclatura de heterociclos

NOMBRES

Nombres triviales de sistemas anulares comunes

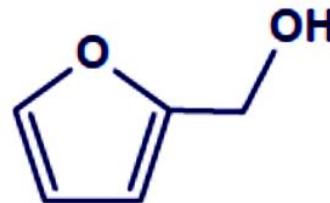
- Nombres “triviales” o “comunes” que se basaban en el origen, propiedad física o biológica; o preferencia del descubridor.
- “No contienen información estructural útil”
- Reconocidos por la IUPAC.



Picolina

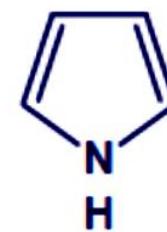
picatus

“alquitranado”



Furfurol

“aceite de salvado”



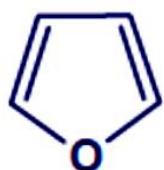
Pirrol

“rojo encendido”

Tabla 1. Heterociclos con nombres triviales “reconocidos”



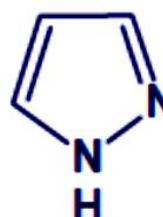
Pirrol^a



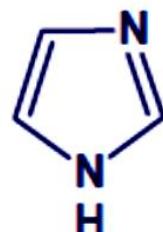
Furano



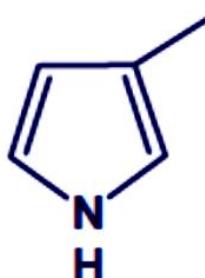
Tiofeno



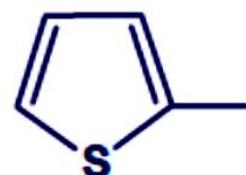
Pirazol^a



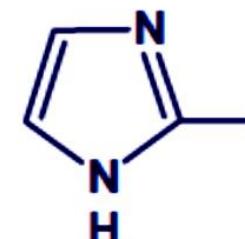
Imidazol^a



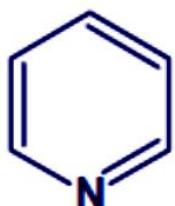
Pirrol-3-il



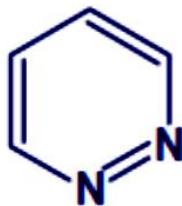
Tien-2-il



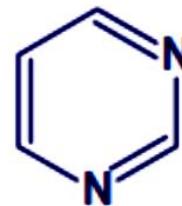
Imidazol-2-il



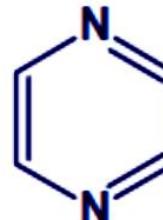
Piridina



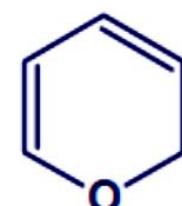
Piridazina



Pirimidina



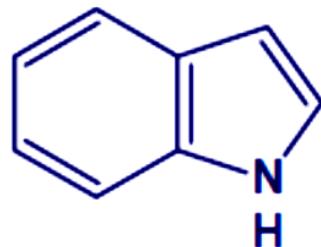
Pirazina



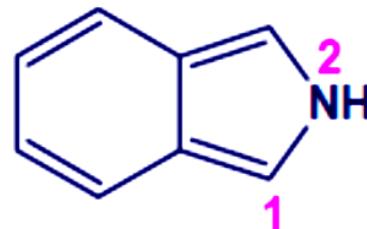
Pirano^b

^aSe muestra el tautómero 1H. ^bTautómero 2H.

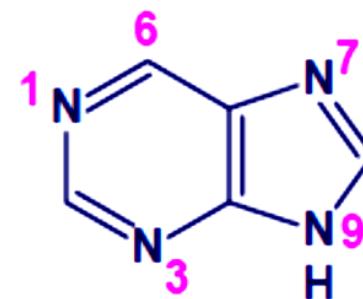
Tabla 1. Heterociclos con nombres triviales “reconocidos”



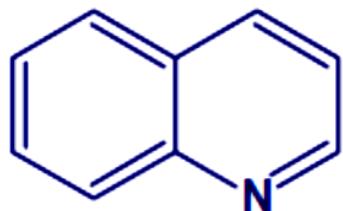
Indola^a



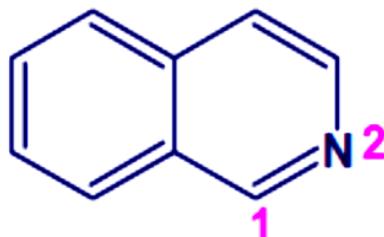
Isoindol^b



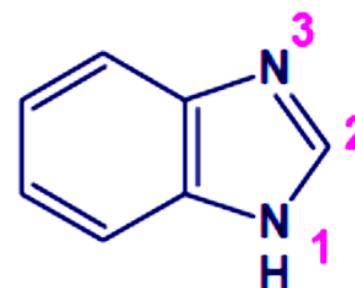
Purina^c



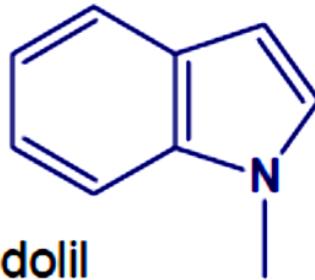
Quinolina



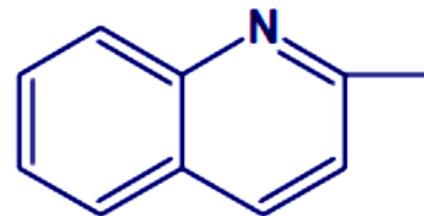
Isoquinolina



Bencimidazol^a



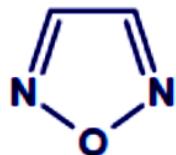
Indolil



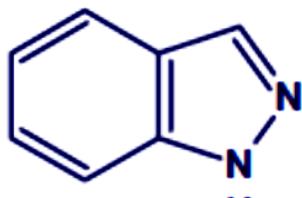
2-Quinolil

^aSe muestra el tautómero 1H. ^bTautómero 2H. ^cTautómero 9H

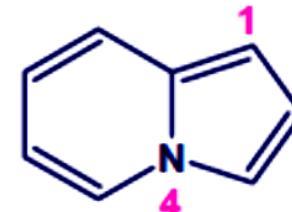
Tabla 1. Heterociclos con nombres triviales “reconocidos”



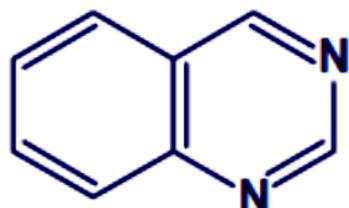
Furazano



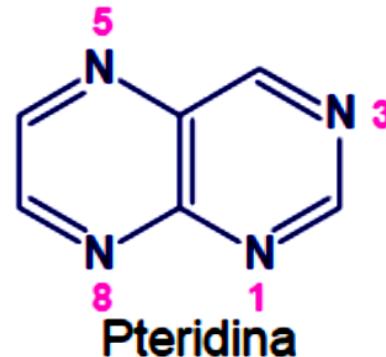
Indazol^a



Indazolina



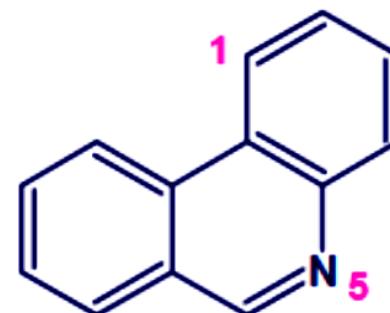
Quinazolina



Pteridina



Fenazina



Fenantridina

^aSe muestra el tautómero 1H

Nomenclatura Sistemática (Hantzsch-Widman) para Sistemas mononucleares

Para compuestos monocíclicos, la nomenclatura apropiada se deriva combinando un **prefijo** y **sufijo** apropiado a determinada **raíz** según las reglas siguientes:

- ❖ **Prefijo:** denota la naturaleza del heteroátomo.
- ❖ **raíz:** Tamaño del anillo.
- ❖ **Sufijo:** Específica el grado de insaturación.

Prefijo-Raíz-Sufijo



- a) La naturaleza del heteroátomo se denota mediante prefijos como **oxo**, **tio** o **aza** para **oxígeno**, **azufre** o **nitrógeno** respectivamente.
- b) La multiplicidad del mismo heteroátomo se designa mediante un prefijo adicional como di, tri, tetra, etc.
- c) Cuando existen dos o más heteroátomos se nombran en el siguiente orden: O > S > N; por ejemplo **Oxazo** (O y N), **Tiazo** (S y N) y **Oxatio** (O y S).

Tabla 2. Tabla de prefijos comunes

ELEMENTO	VALENCIA	PREFIJO ^a
Oxígeno	II	Oxa
Azufre	II	Tia
Selenio	II	Selena
Teluro	II	Telura
Nitrógeno	III	Aza
Fósforo	III	Fosfa
Arsénico	III	Arsa
Silicio	IV	Sila
Germanio	IV	Germa
Boro	III	Bora

^aLa “a” final se elimina cuando el prefijo va seguido por una vocal

- d) El tamaño del anillo se denota mediante la **raíz** adecuada seleccionada de la **Tabla 3**.
- e) El grado de insaturaciones se especifica mediante el **sufijo** como se observa en la **Tabla 3**. Es conveniente observar que el sufijo se modifica ligeramente cuando no hay nitrógeno en el anillo heterocíclico.

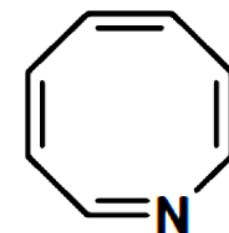
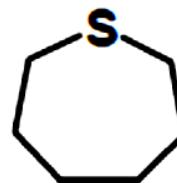
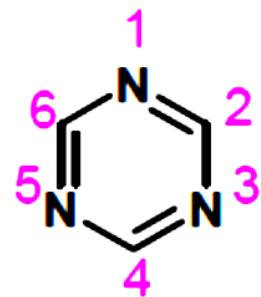
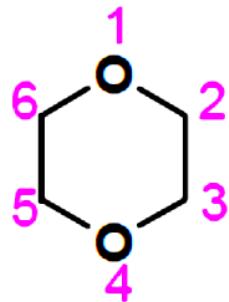
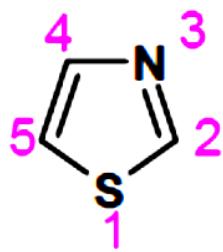
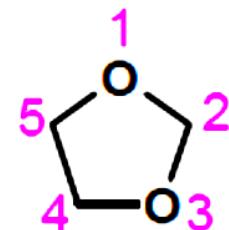
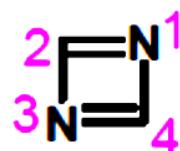
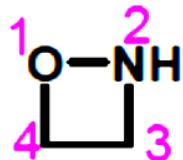
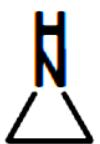
Tabla 3. Raíz y sufijos para heterociclos monocíclicos de tres a diez miembros.

Tamaño anillo ^a	Raíz	Raíz y terminación (sufijo)			
		Anillo insaturado ^b		Anillo saturado	
3	-ir-	-ireno	N: -irina	-irano	N: -iridina
4	-et-		-ete	-etano	N: -etidina
5	-ol-		-ol	-olano	N: -olidina
6	-in	-ina	P, As, B: inina	-inano	O, S, Se, Te: -ano
7	-ep		-epina		-epano
8	-oc-		-ocina		-ocano
9	-on-		-onina		-onano
10	-ec-		-ecina		-ecano

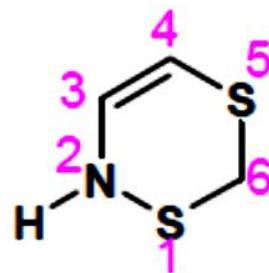
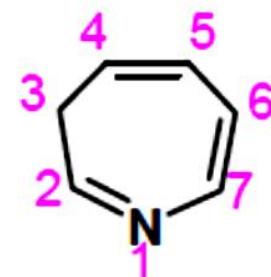
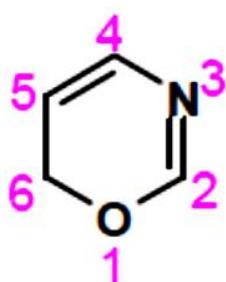
^a Para sistemas heterocíclicos de más de 10 átomos se recomienda el uso de la nomenclatura de reemplazo.

^b Corresponde al número máximo de dobles enlaces conjugados. (Excluyendo dobles enlaces acumulativos)

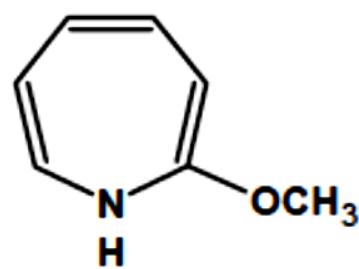
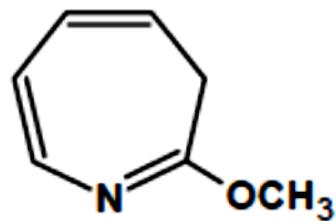
f) La numeración del anillo comienza con el heteroátomo de mayor prioridad y prosigue alrededor del anillo para dar los números menores posibles a los otros heteroátomos o sustituyentes.



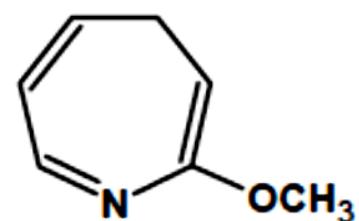
g) Cuando un sistema que tiene el máximo número de dobles enlaces todavía contiene un átomo “saturado” en el anillo, este se indica con un número que indica su posición y la letra *H*- capital cursiva como prefijo. Cuando se puede elegir la numeración, se asigna el número lo más bajo posible a la posición indicada.



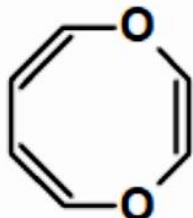
h) Cuando el mismo nombre sirve para dos o más sistemas de anillos isómeros con el número máximo de dobles enlaces no acumulativos, y dicho nombre puede hacerse específico indicando la posición de uno o más átomos de hidrógeno en la estructura, se modifica el nombre mediante un número seguido por la letra *H*- capital cursiva para cada uno de dichos átomos de hidrógeno. Dichos símbolos suelen preceder al nombre.



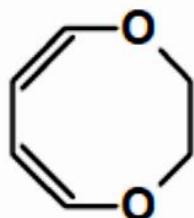
2-metoxi-1*H*-azepina



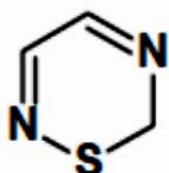
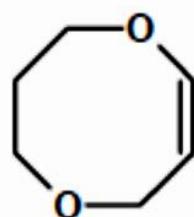
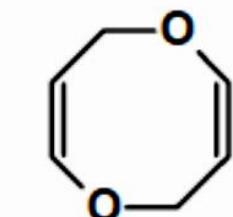
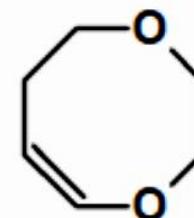
- i) No se utilizan sufijos para ciclos parcialmente insaturados.
Se utiliza el sufijo del heterociclo insaturado y se indica la presencia de la(s) saturación(es) mediante un localizador numérico; la multiplicidad mediante un prefijo adicional como di, tri, tetra y la palabra hidro.



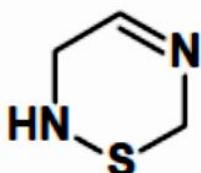
1,4-Dioxocina



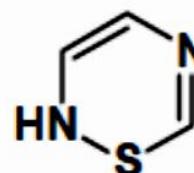
2H, 6H-1,5-dioxocina



6H-1,2,5-triadiazina



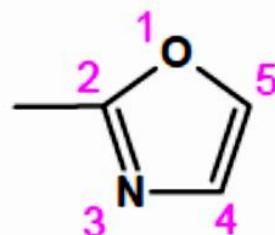
y no 2H-1,3,6-triadiazina



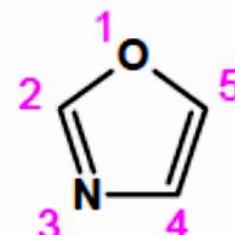
2H-1,2,5-triadiazina

RADICALES

Los radicales univalentes derivados de los compuestos heterocíclicos se nombran por adición de la terminación “ilo” al nombre del compuesto (eliminando la última vocal) e indicando la posición del radical.



1,3-oxazol-2-il

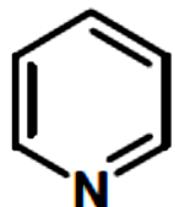


1,3-oxazol

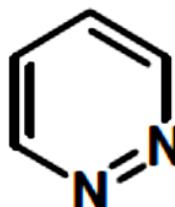
Tabla 4. Excepciones a la Regla

Heterociclo	Radical
Furano	Furil
Piridina	Piridil
Piperidina	Piperidil
Quinolina	Quinolil
Isoquinolina	Isoquinolil
Tiofeno	Tienil

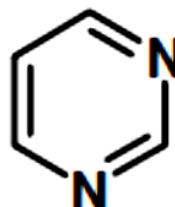
Estos nombres no reemplazan a los **nombres triviales** reconocidos:



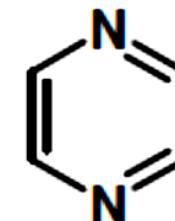
Piridina
(Azina)



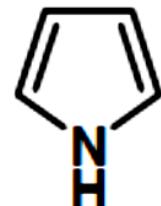
Piridazina
(1,2-Diazina)



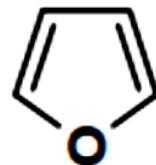
Pirimidina
(1,3-Diazina)



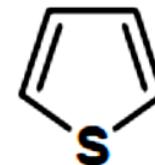
Pirazina
(1,4-Diazina)



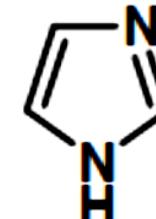
Pirrol
(1H-Azol)



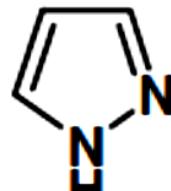
Furano



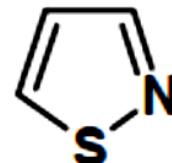
Tiofeno



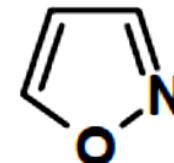
Imidazol
(1H-1,3-Diazol)



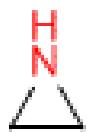
Pirazol
(1H-1,2-Diazol)



Isotiazol



Isoxazol



aziridina



azirina



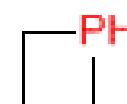
oxirano



oxireno



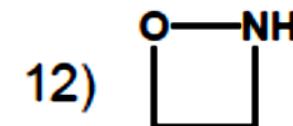
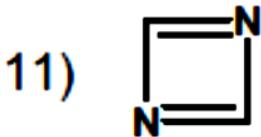
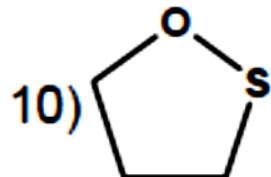
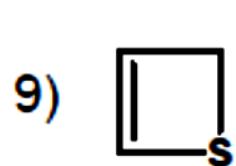
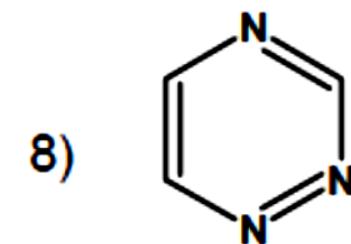
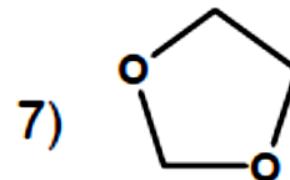
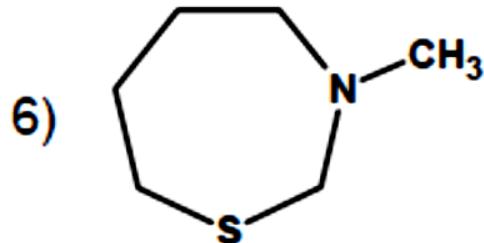
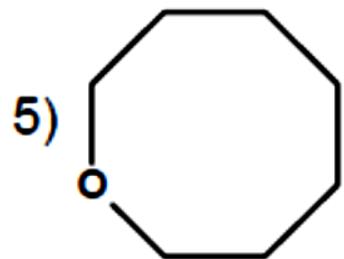
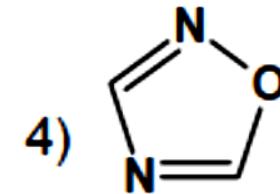
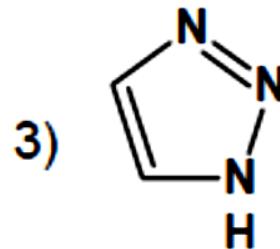
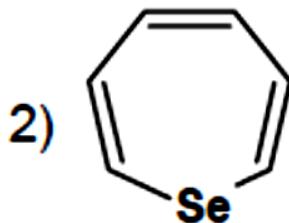
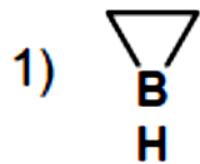
fosfeto



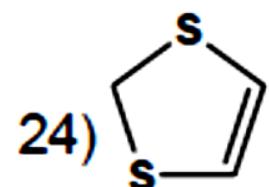
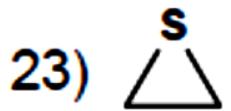
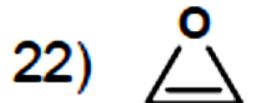
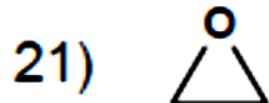
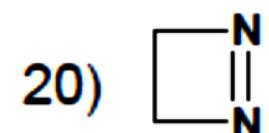
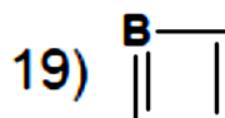
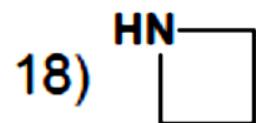
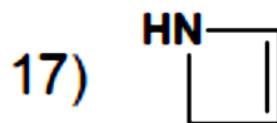
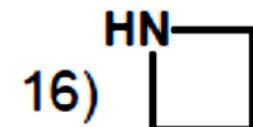
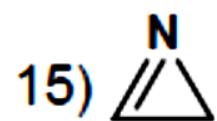
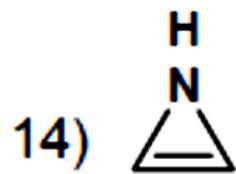
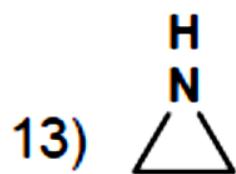
fosfetano

Tarea 1

Asigne un nombre a cada uno de los siguientes compuestos empleando la nomenclatura sistemática de Hantzsch-Widman

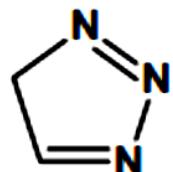


Asigne un nombre a cada uno de los siguientes compuestos empleando la nomenclatura sistemática de Hantzsch-Widman

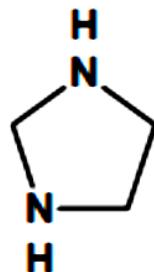


Asigne un nombre a cada uno de los siguientes compuestos empleando la nomenclatura sistemática de Hantzsch-Widman

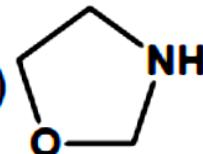
25)



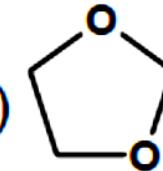
26)



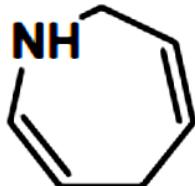
27)



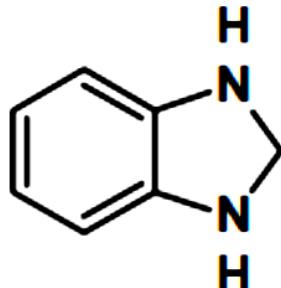
28)



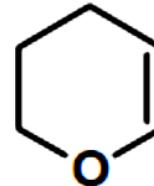
29)



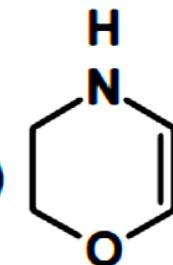
30)



31)



32)



Dibuje una estructura para cada uno de los siguientes compuestos siguiendo las reglas del Sistema de Hantzsch-Widman.

33) Borinina

34) 2,3-dihidro-1,2,3-oxadiazol

35) Fosfinano

36) 1,2,3-oxaditiol

37) Borinano

38) 2,3-dihidro-1,4,2,5-dioxadiazina

39) Fosfinina

40) 7,8-dihidro-1,4,6-oxatiazocina

En 1957, la Comisión de Nomenclatura IUPAC de Química Orgánica codificó esta extensión del sistema de Hantzsch-Widman como parte de sus reglas para la nomenclatura de la química orgánica.⁵ Los heteroátomos a los cuales el sistema especificado y aplicadas fueron determinadas excepciones y modificaciones se observaron con el fin de evitar la formación de nombres idénticos con algunos ya en uso para los compuestos completamente diferentes.

Unión Internacional de Química Pura y Aplicada, Nomenclatura de Química Orgánica (1957), secciones A y B, 1^a ed, Butterworths, Londres, 1958. [A] la regla B-1, pp 51-53; [b] Regla B-1.1, la Tabla I, p. 51, [c] 2^a ed, Butterworths, Londres, 1966, cuadro I, p.. 51.

El nombre de los heterociclos de 3 a 10 eslabones se construye utilizando el sistema ampliado de Hantzsch-Widman a partir del **tipo de heteroátomo**, el **tamaño del ciclo** y la presencia o no de una máxima **cantidad de insaturaciones conjugadas**

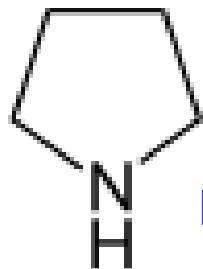
Tipo de heteroátomo: Dependiendo del tipo de heteroátomo se utilizarán los siguientes prefijos (ordenados en forma descendente según sus prioridades relativas):

Tamaño del heterocíclo	Saturado	Completamente insaturado
3	-irano ^{b. 1}	-ireno ^{b. 1}
4	-etano ^{b. 1}	-eto
5	-olano ^{b. 1}	-ol
6	-inano ^{b. 2}	-ina ^{b. 3}
7	-epano	-epina
8	-ocano	-ocina
9	-onano	-onina
10	-ecano	-ecina

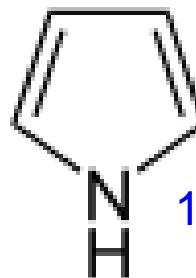
Excepciones:

1. **a b c d Nitrógeno:** sat.(3): -iridina; c. insat(3): -irina; sat.(4): -etidina; sat.(5): -olanidina
2. **Oxígeno, Azufre, Selenio, Telurio, Bismuto, Mercurio:** sat(6): -ano
3. Fósforo, Arsénico, Antimonio y Boro: **c. insat(6): -inina**

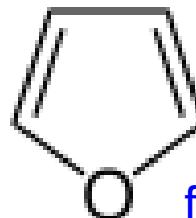
Algunos heterociclos son mejor conocidos por sus nombres triviales o comunes, muchos de los cuales han sido aceptados por la IUPAC



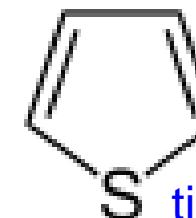
pirrolidina



1H-pirrol



furano



tiofeno



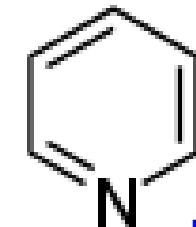
selenofeno



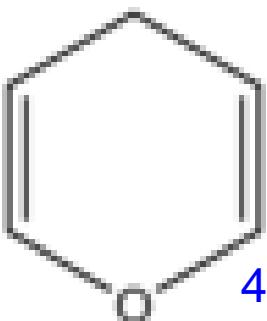
telurofeno



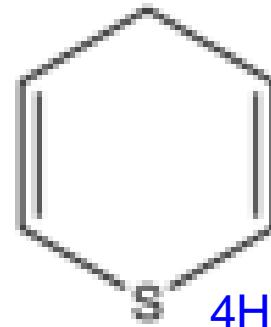
piperidina



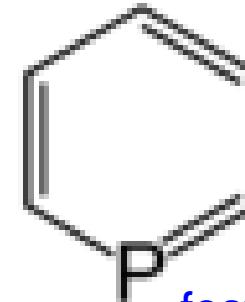
piridina



4H-pirano



4H-tiopirano



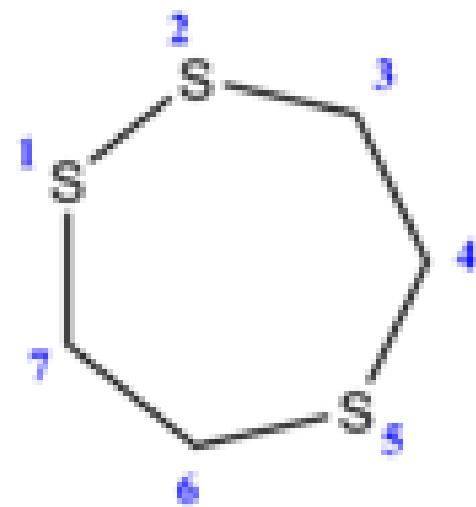
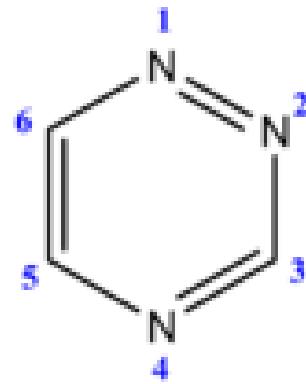
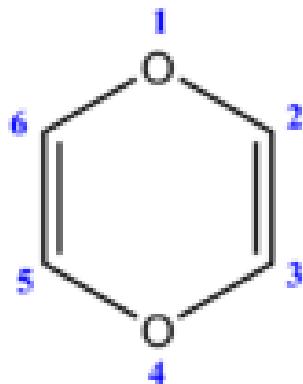
fosforina

Heterociclos con más de un heteroátomo

Heteroátomos del mismo elemento

Los heterociclos que poseen más de un heteroátomo del mismo elemento se nombran mediante las siguientes reglas:

- La multiplicidad se indica utilizando los prefijos *di*, *tri*, *tetra*, etc.
- Se numeran las posiciones relativas de los heteroátomos en forma tal que los heteroátomos queden con la menor numeración posible.



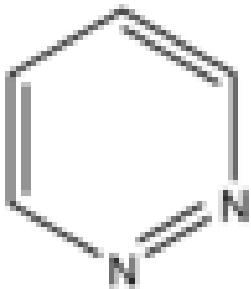
Algunos heterociclos con dos heteroátomos del mismo elemento son conocidos por sus nombres comunes o triviales, entre ellos se encuentran:



1H-pirazol



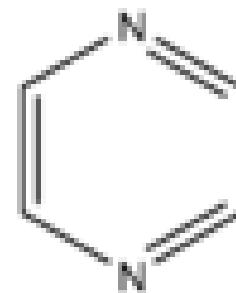
1H-imidazol



piridazina



pirimidina

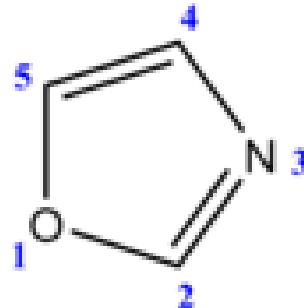


pirazina

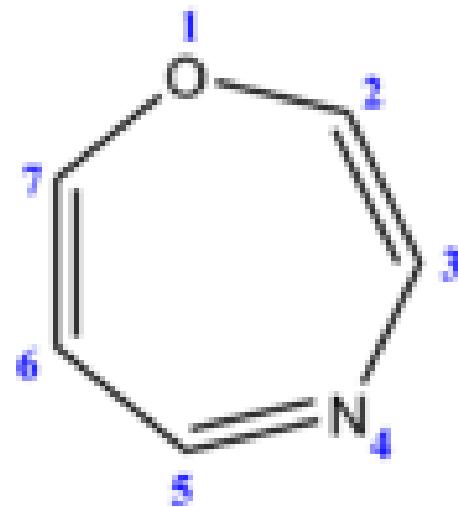
Heteroátomos de diferentes elementos

Si los heteroátomos del ciclo son de diferentes elementos:

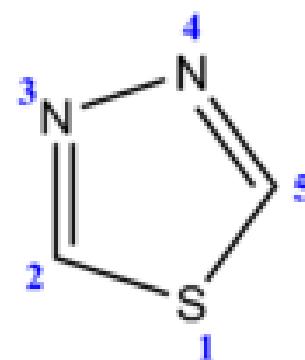
- Los heteroátomos se numeran empezando por el heteroátomo de mayor prioridad y siguiendo la numeración en dirección en la cual los heteroátomos de menor o igual prioridad posean la menor numeración posible.
- Para nombrar el compuesto, se utilizan los prefijos de cada heteroátomo en orden de prioridad.



1,3-oxazol

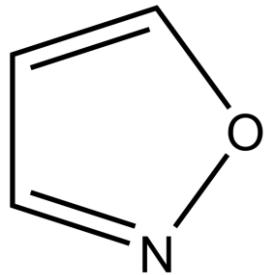


1,4-oxazepina

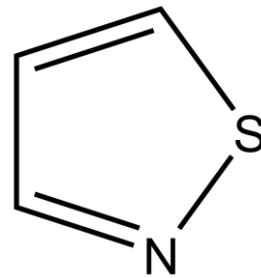


1,3,4-tiadiazol

Algunos heterociclos con dos heteroátomos de diferentes elementos son conocidos por sus nombres comunes o triviales, entre ellos se encuentran:



isoxazol

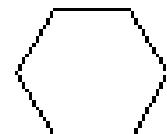


isotiazol

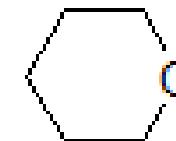
Heterociclos con más de 10 miembros

Los heterociclos con más de 10 eslabones se nombran utilizando la nomenclatura de reemplazo. La nomenclatura de reemplazo implica el intercambio de un átomo de carbono por un heteroátomo. Se utilizan sobre todo:

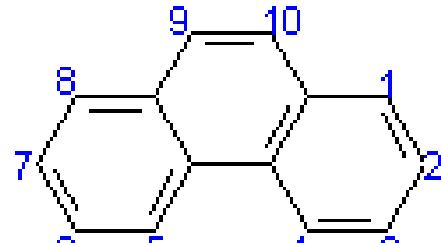
- prefijos especiales relacionados con el átomo a reemplazar, que por regla general terminan en “a”,
- números que indican la posición del átomo reemplazado.



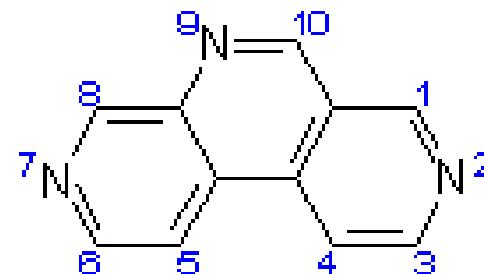
Ciclohexano



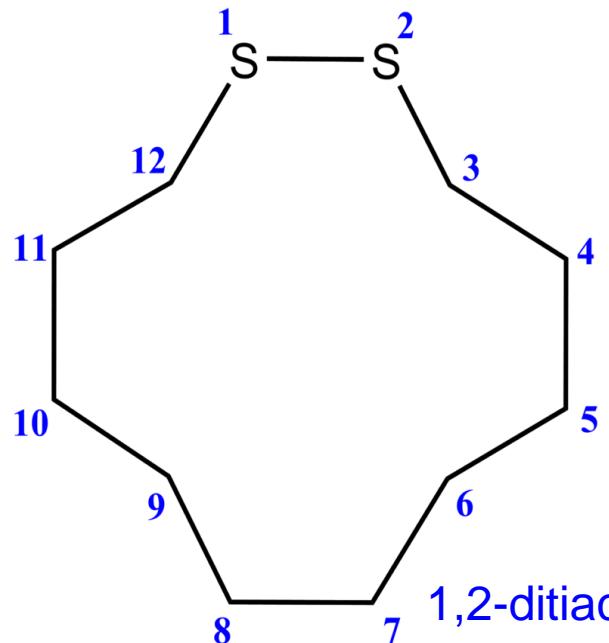
Oxaciclohexano
(Prefijo de reemplazo: Oxa-)



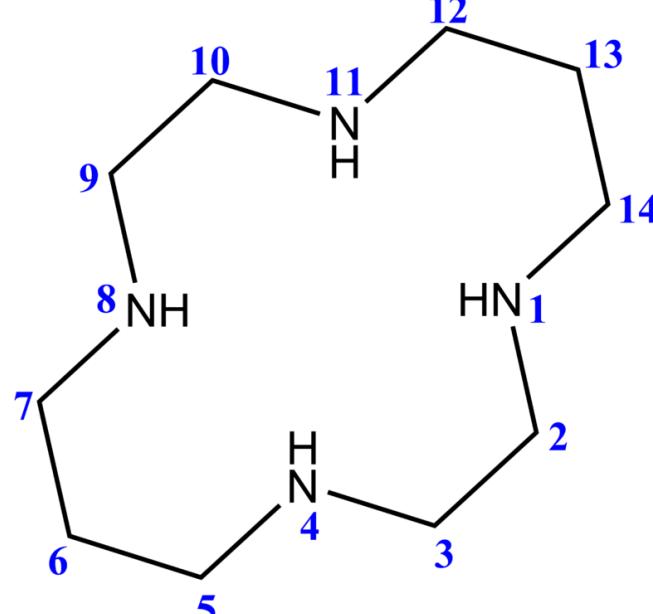
Fenanreno



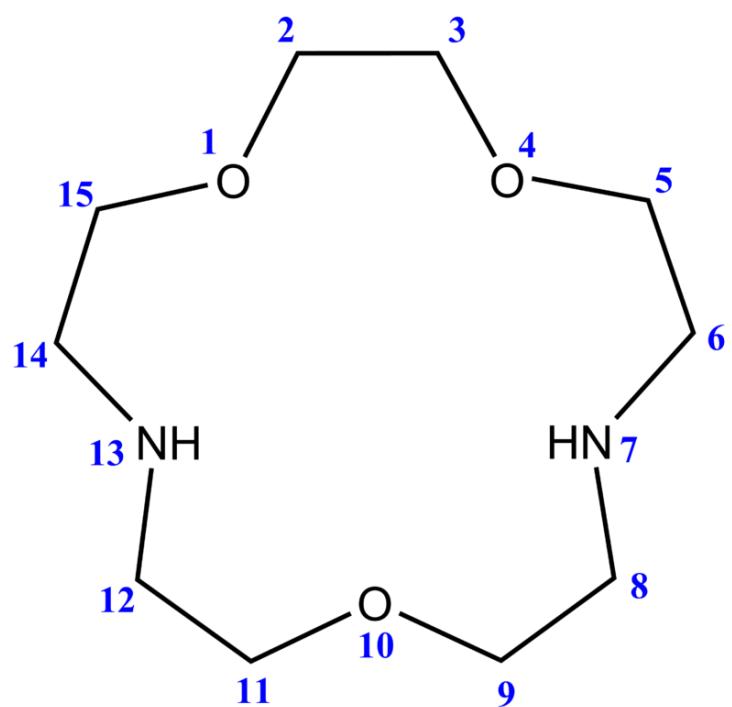
2,7,9-Triazafenanreno
(Prefijo de reemplazo = Aza-)



1,2-ditiaciclododecano



1,4,8,11-tetraazacicotetradecano

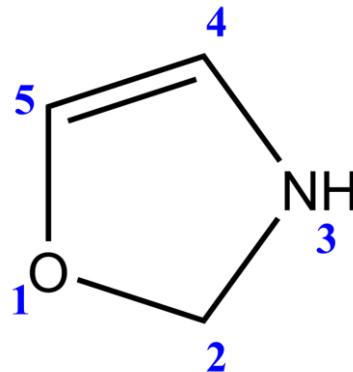


1,4,10-trioxa-7,13-diazaciclopentadecano

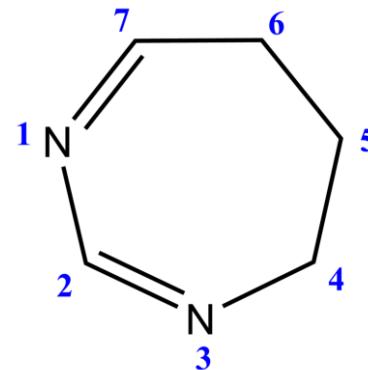
Heterociclos parcialmente saturados

En los heterociclos parcialmente saturados se especifican las posiciones de la saturaciones y posteriormente se nombra el ciclo con el nombre correspondiente al ciclo completamente insaturado.

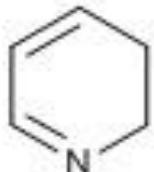
- Cuando las saturaciones se encuentran aisladas (completamente rodeadas de insaturaciones), se indican anteponiendo al nombre del compuesto p_1H, p_2H, p_nH - donde p representa la posición de la saturación.
- Cuando las saturaciones se producen en dos carbonos adyacentes se utiliza el prefijo *n*-hidro-, donde n indica la cantidad (di-, tetra-, etc.) de saturaciones consecutivas.¹¹
- Las saturaciones aisladas tienen prioridad en la numeración sobre las saturaciones adyacentes.
- En los casos donde se encuentre un número impar de insaturaciones consecutivas, se nombra la saturación de numeración más baja como si esta fuera una saturación aislada y las restantes como saturaciones consecutivas.



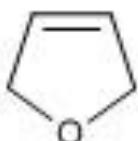
2,3-dihidro-1,3-oxazol



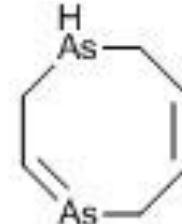
5,6-dihidro-4H-1,3-diazepina



2,3-Dihdropiridina

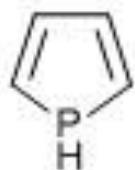


2,5-Dihidrofurano



1,2,5,8-Tetrahidro-1,4-diarsocina

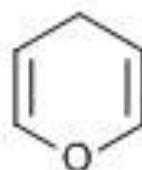
En los siguientes ejemplos están presentes el máximo número de dobles enlaces no acumulados, y también existe un átomo del anillo unido a los átomos contiguos sólo por enlaces sencillos. Si ese átomo posee, además, uno (o dos) átomos de hidrógeno, ese hidrógeno (o uno de los dos) recibe el nombre de hidrógeno indicado, y debe hacerse constar en el nombre.



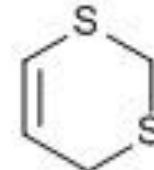
1H-Fosfol (T)



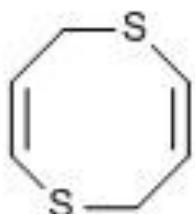
3H-Fosfol (U)



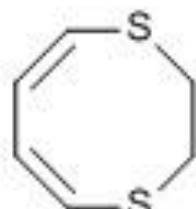
4H-Pirano (V)



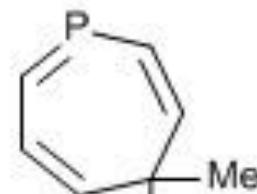
2H,4H-1,3-Ditiina (Z)



2H,6H-1,5-Ditiocina (X)



2,3-Dihidro-1,4-ditiocina (Y)



4,4-Dimetil-4H-fosfepina (W)

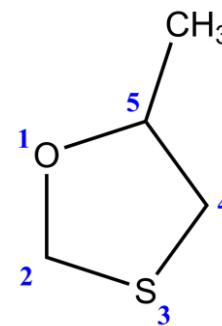
Heterociclos con sustituyentes

Los heterociclos poseen una prioridad en la nomenclatura similar a los éteres. Por lo tanto, serán el grupo funcional principal solamente cuando sean sustituidos por restos alquilo, alquenilo, alquinilo, arilo, halogenuros, nitroderivados y éteres.

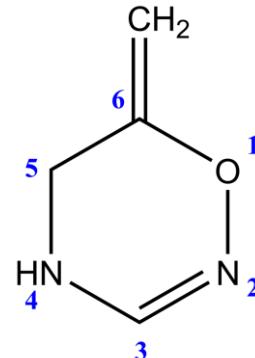
En todos los casos, la numeración del ciclo estará dada por las reglas anteriormente descriptas.

La nomenclatura adquiere una mayor complejidad cuando los sustituyentes se encuentran unidos al heterociclo a través de un doble enlace. En estos casos, los átomos de carbono con doble enlace del heterociclo son considerados, en la mayoría de los casos, como saturados.

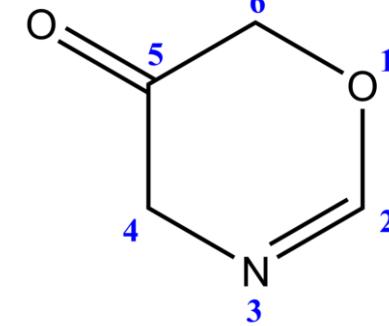
La nomenclatura de estos carbonos dependerá principalmente de la *prioridad del sustituyente* unido a través de un doble enlace con respecto al heterociclo y/o al grupo funcional más importante del compuesto, de la existencia de *saturaciones aisladas* o asociadas a la introducción de la insaturación puntual y de la *máxima cantidad de insaturaciones* que puede presentar el heterociclo base completamente insaturado.



5-metil-1,3-tioxolano



6-metilen-5,6-dihidro-
4H-1,2,4-oxadiazina



4H-1,3-oxazin-5(6H)-ona