

2.4. Sistemas Heterocíclicos

- Son **ciclos** formados por uno o más átomos distintos del carbono, **heteroátomos**. Los más frecuentes son **O, S, N**.
- La mayoría poseen un nombre común: furano, pirrol, tiofeno, piridina,...
- Los que no tienen nombre común se nombran siguiendo las reglas de Hantzsch-Widman, en la que se combinan una serie de **prefijos** y **sufijos**.
 - a. Los prefijos indican el tipo heteroátomo: **oxa-** (O), **tia-** (S), **aza-** (N). Si hay más de un heteroátomo en un heterociclo se considera este orden de prioridad: $O > S > N$. Si existen dos o más heteroátomos iguales se anteponen las partículas di-, tri-, tetra, etc.
 - b. Los sufijos indican la presencia de **N**, el **tamaño** del ciclo y su **grado de saturación**
- La numeración de los ciclos con un solo heteroátomo comienza por éste. Si son de distinta naturaleza, se empieza a numerar por el de prioridad superior.

2.4. Sistemas Heterocíclicos

- Sufijos para los heterocíclicos

TAMAÑO	CON NITRÓGENO		SIN NITRÓGENO	
	Insaturado	Saturado	Insaturado	Saturado
3	-irina	-iridina	-ireno	-irano
4	-eto	-etidina	-eto	-etano
5	-ol	-olidina	-ol	-olano
6	-ina	*	-ino	-ano
7	-epina	*	-epino	-epano
8	-ocina	*	-ocino	-ocano
9	-onina	*	-onino	-onano
10	-ecina	*	-ecino	-ecano

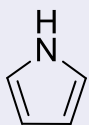
*Perhidro seguido de la terminación de los heterociclos insaturados

2.4. Sistemas Heterocíclicos

- Sufijos para los heterocíclicos – Grado de insaturación

Insaturación Parcial – se indica la posición de los **átomos saturados**.

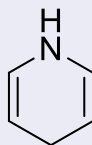
- a. **Un átomo** saturado – se antepone la partícula “**H**” y la posición de la saturación, dando el localizador más bajo a la saturación.
- b. **Dos átomos** saturados – se antepone la partícula “**dihidro**” y la posición de los átomos saturados con los localizadores más bajos posibles.
- c. **Más de dos átomos** saturados –
 - pares – se antepone la partícula “tetrahidro”, “hexahidro”, debidamente localizada.
 - impares – se antepone primero la partícula que corresponda para la saturación par y después “H” para la saturación impar, con el localizador más bajo para el H.



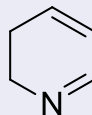
1H-azol
1H-pirrol
pirrol



3H-azol
3H-pirrol



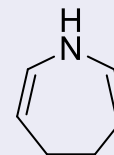
1,4-dihidroazina
1,4-dihidropiridina



2,3-dihidroazina
2,3-dihidropiridina



oxolano
Tetrahidrofurano
THF



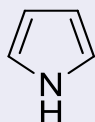
4,5-dihidro-1H-azepina

2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

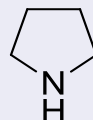
2.4. Sistemas Heterocíclicos

TAMAÑO	CON NITRÓGENO		SIN NITRÓGENO	
	Insaturado	Saturado	Insaturado	Saturado
3	-irina	-iridina	-ireno	-irano
4	-eto	-etidina	-eto	-etano
5	-ol	-olidina	-ol	-olano
6	-ina	*	-ino	-ano
7	-epina	*	-epino	-epano
8	-ocina	*	-ocino	-ocano
9	-onina	*	-onino	-onano
10	-ecina	*	-ecino	-ecano

Esqueletos heterocíclicos de 5 miembros



azol
pirrol



azolidina
pirrolidina



oxol
furano



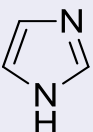
oxolano
tetrahydrofurano



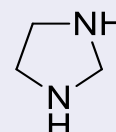
tiol
tiofeno



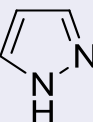
tiolano
tetrahidrotiofeno



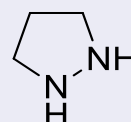
1,3-diazol
imidazol



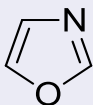
1,3-diazolidina
imidazolidina



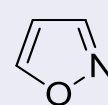
1,2-diazol
pirazol



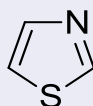
1,2-diazolidina
pirazolidina



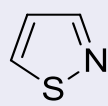
1,3-oxazol
oxazol



1,2-oxazol
isoxazol



1,3-tiazol
tiazol



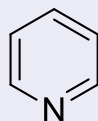
1,2-tiazol
isotiazol

2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

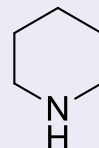
2.4. Sistemas Heterocíclicos

TAMAÑO	CON NITRÓGENO		SIN NITRÓGENO	
	Insaturado	Saturado	Insaturado	Saturado
3	-irina	-iridina	-ireno	-irano
4	-eto	-etidina	-eto	-etano
5	-ol	-olidina	-ol	-olano
6	-ina	*	-ino	-ano
7	-epina	*	-epino	-epano
8	-ocina	*	-ocino	-ocano
9	-onina	*	-onino	-onano
10	-ecina	*	-ecino	-ecano

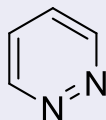
Esqueletos heterocíclicos de 6 miembros



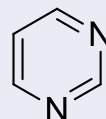
azina
piridina



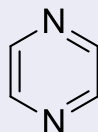
perhidroazina
piperidina



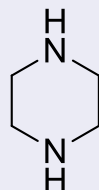
1,2-diazina
piridazina



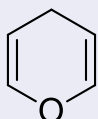
1,3-diazina
pirimidina



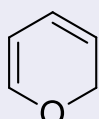
1,4-diazina
pirazina



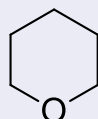
1,4-perhidrodiazina
piperazina



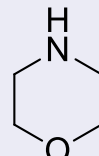
4H-oxino
4H-pirano



2H-oxino
2H-pirano



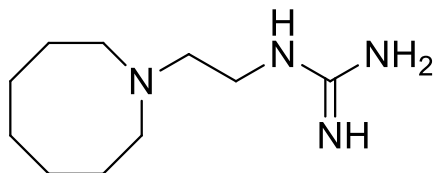
oxano
tetrahidropirano



1,4-perhidroxazina
morfolina

2.4. Sistemas Heterocíclicos

Guanetidina (antihipertensivo)



Heterociclo: perhidroazocina - radical: perhidroazocinilo

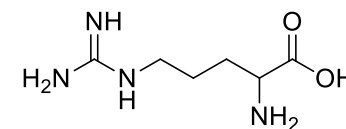
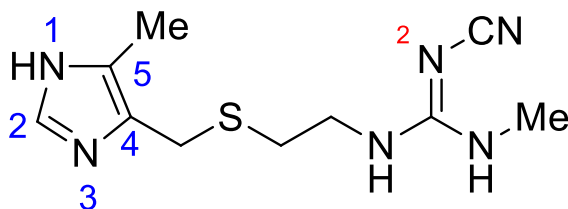
Función ppal: **guanidina**

Sustituyentes: *N*-(2-perhidroazocin-1-iletil)

N-(2-perhidroazocin-1-iletil)guanidina

2.4. Sistemas Heterocíclicos

Cimetidina (antiulceroso)



Arginina

Heterociclo: imidazol - radical: 4-imidazolilo

Función ppal: **guanidina**

Sustituyentes: **2-ciano**

1-metil

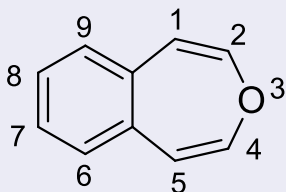
2- {2-[(5-metilimidazol-4-il)metiltio]etil}

2-ciano-1-metil-3-{2-[(5-metilimidazol-4-il)metiltio]etil}guanidina

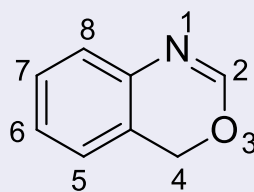
2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - Benzoheterociclos

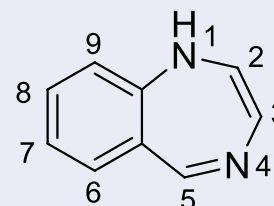
- Cuando tenemos dos anillos y uno de ellos es el benceno condensado a un heterociclo se nombra usando la palabra **benzo-** seguido del **nombre del heterociclo** y se precede con un número que corresponde a la posición del heteroátomo.
- Se numera empezando por el átomo contiguo al carbono de fusión, dándole la numeración más baja posible a los heteroátomos y completando el anillo.



3-Benzoxepino



4H-3,1-Benzoxazina



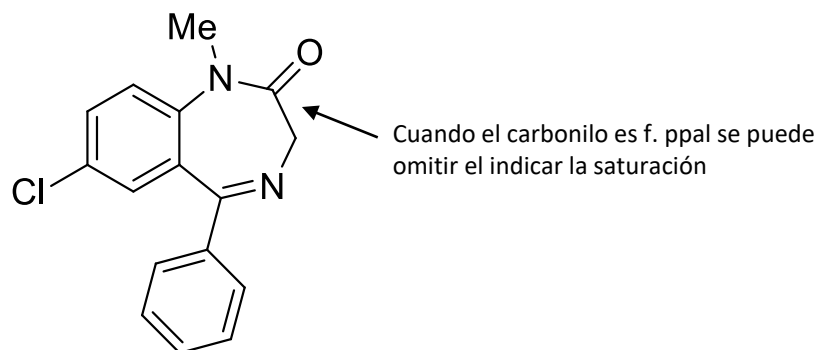
1H-1,4-Benzodiazepina



Formular el compuesto 4H-1,3-Benzoxazina

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - **Benzoheterociclos**

Diazepam (ansiolítico, anticonvulsivo, hipnótico y sedante)



Heterociclo condensado: 1,3-dihidro-1,4-benzodiazepina

Función ppal: cetona **-2-ona**

Sustituyentes: 1-metil

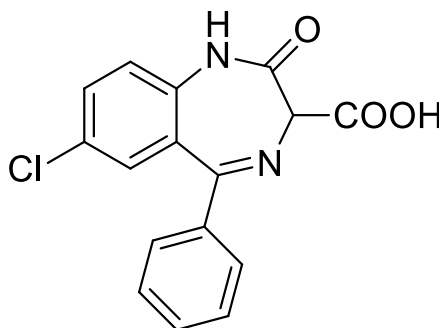
5-fenil

7-cloro

7-Cloro-5-fenil-1-metil-1,3-dihidro-1,4-benzodiazepin-2-ona

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - **Benzoheterociclos**

Clorazepato (ansiolítico, anticonvulsivo, hipnótico y sedante)



Heterociclo condensado: 2,3-dihidro-1*H*-1,4-benzodiazepina

Función ppal: **ácido 3-carboxílico**

Sustituyentes: 2-oxo

5-fenil

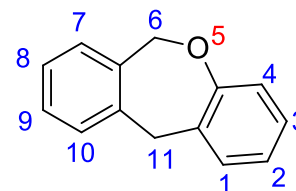
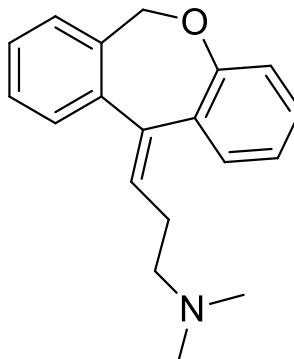
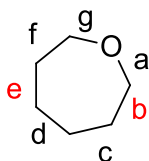
7-cloro

Ácido 7-cloro-5-fenil-2-oxo-2,3-dihidro-1*H*-1,4-benzodiazepin-3-carboxílico

2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - **Benzoheterociclos**

Doxepina (antidepresivo)



a. Función ppal. Heterociclo condensado

Heterociclo condensado: 6,11-dihidrodibenzo[*b,e*]oxepino

Sustituyente: 11-[3-(dimetilamino)propiliden]

b. Función ppal. amina

Función ppal: propanamina

Sustituyente: *N,N*-dimetil

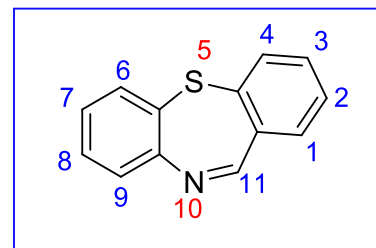
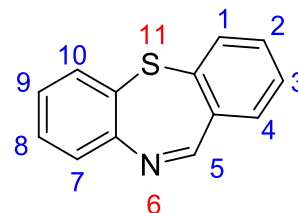
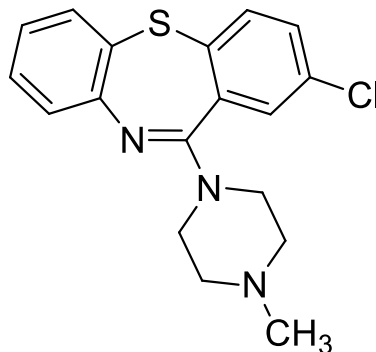
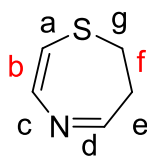
3-(6,11-dihidrodibenzo[*b,e*]oxepin-11-iliden)

11-[3-(dimetilamino)propiliden]-6,11-dihidrodibenzo[*b,e*]oxepino

3-(6,11-dihidrodibenzo[*b,e*]oxepin-11-iliden)-*N,N*-dimetilpropanamina

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - **Benzoheterociclos**

Clotiapina (antipsicótico)



Heterociclo condensado: dibenzo-[*b, f*]-1,4-tiazepina

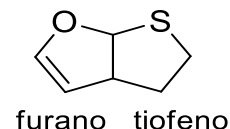
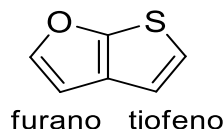
Sustituyente: 2-cloro

11-(4-metilpiperazin-1-il)

2-cloro-11-(4-metilpiperazin-1-il)-dibenzo-[*b, f*]-1,4-tiazepina

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados - Nomenclatura

1. Desglosar la molécula en componentes simples. Se consideran totalmente insaturados.



2. Elegir uno de los componentes simples como heterociclo base. Ej: Furano
3. Escribir el nombre del **heterociclo base**.
4. Colocar delante un corchete para **localizar el enlace común**.
5. Escribir delante del corchete el nombre alterado del **heterociclo no base**. Se nombra sustituyendo la terminación *-ilo* del correspondiente radical por *-o*. Prefijos más usados: *furo* – furano, *imidazo* – imidazol, *isoquino* – isoquinolina, *pirido* – piridina, *pirazino* – pirazina, *pirano* – pirano, *pirimido* – pirimidina, *quino* – quinolina, *tieno* – tiofeno, *pirrolo* – pirrol, *pirazolo* – pirazol .

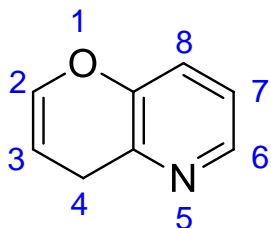
Tieno [] furano

6. Numerar el heterociclo condensado completo, empezando por el carbono contiguo al carbono de fusión dándole la numeración más baja posible a los heteroátomos.
7. Indicar el grado de saturación de los átomos.

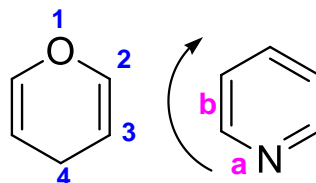
2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados – Localización del Enlace Común

Se hace mediante el uso de números y letras. La **letra minúscula** localiza el enlace común del heterociclo base y los **dos números** que localizan del enlace común del heterociclo no base.

1. Numeramos el heterociclo base en el sentido en el cual lleguemos lo antes posible al enlace común y le damos letras.
2. Marcamos el sentido de la numeración con una flecha.
3. Numeramos el heterociclo no base en el sentido en el cual lleguemos lo antes posible al enlace común.
4. Siguiendo el sentido del heterociclo base, localizamos el enlace común con los dos números del heterociclo no base y la letra del heterociclo base, separado por un guión.



Numeración del heterociclo



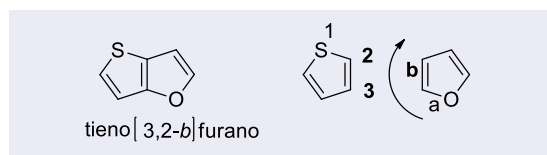
4 *H*-pirano[3,2-*b*]piridina

2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

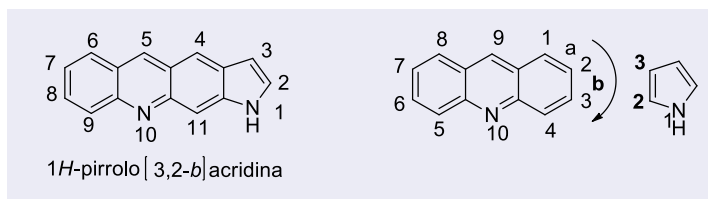
2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados – Elección del Heterociclo Base

Debe cumplir las siguientes reglas en orden riguroso. Se considera heterociclo base aquel que tenga:

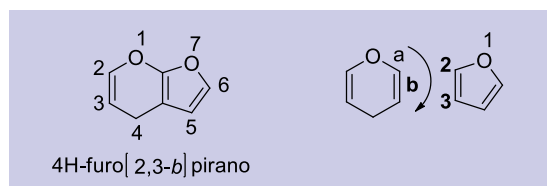
1. Nitrógeno - N
2. En caso de no existir N, el que tenga oxígeno - O y sino azufre -S.



3. Mayor número de ciclos en el sistema y se nombra mediante su nombre común.



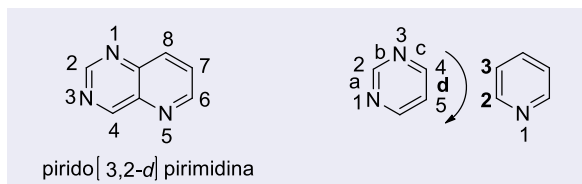
4. Mayor tamaño de anillo.



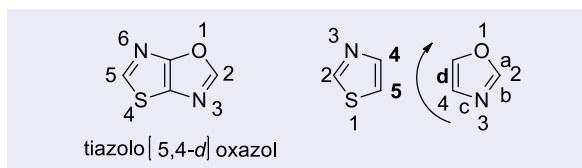
2. Nomenclatura sistemática: reglas IUPAC

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados – Elección del Heterociclo Base

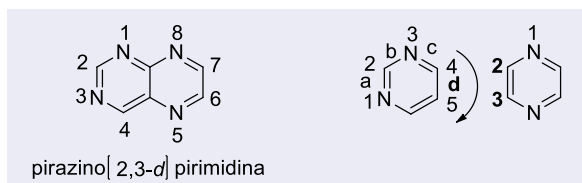
5. Mayor número de heteroátomos.



6. Mayor variedad de heteroátomos, teniendo en cuenta la prioridad de estos $O > S > N$.



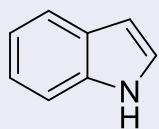
7. Localizadores más bajos para sus heteroátomos.



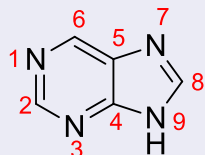
NOTA: Si la posición de fusión está ocupada por un heteroátomo se elegirán los nombres de los componenets del compuesto de forma que ambos contengan al heteroátomo.

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

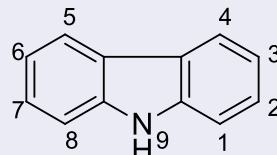
Se nombran y se numeran según reglas de la IUPAC, excepto estos compuestos que tienen nombres comunes y algunos una numeración especial.



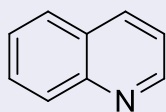
indol



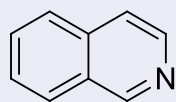
purina



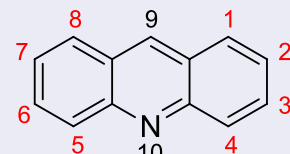
carbazol



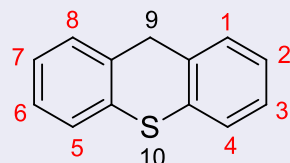
quinolina



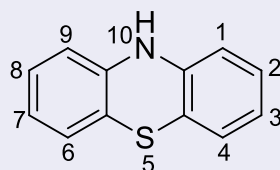
isoquinolina



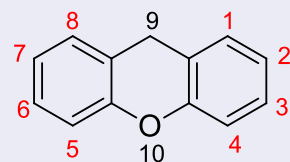
acridina



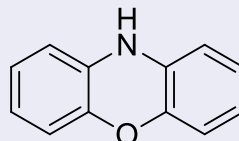
tioxanteno



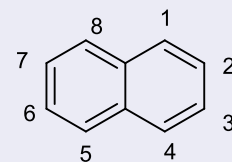
fenotiazina



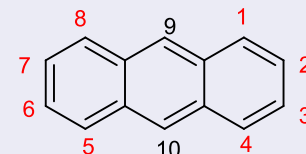
xanteno



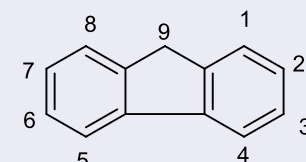
fenoxazina



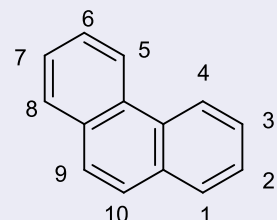
Naftaleno



Antraceno



Fluoreno

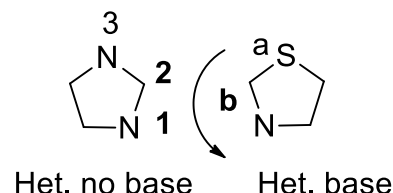
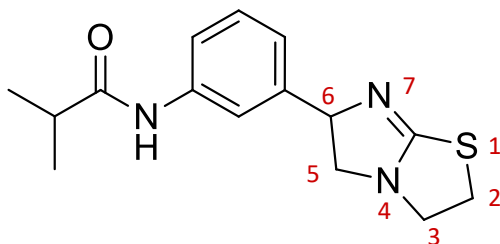


Fenantreno

POLICICLOS
CONDENSADOS

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

Butamisol (antihelmíntico)



a. Función ppal **heterociclo condensado**

Heterociclo condensado: imidazo[2,1-b]tiazol

Sustituyentes: 6-[3-(2-metilpropanamido)fenil]

ó 6-(*m*-isobutanamidofenil)

b. Función ppal. **amida**

Función ppal: Propanamida ó Isobutanamida

Sustituyentes: 2-metil

N-[3-(...)fenil]

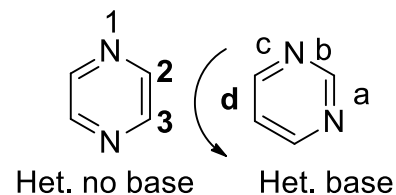
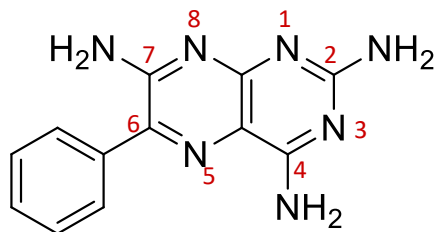
2,3,5,6-tetrahidroimidazo[2,1-b]tiazol-6-il

6-(*m*-isobutanamidofenil)-2,3,5,6-tetrahidroimidazo[2,1-b]tiazol

2-metil-*N*-[3-(2,3,5,6-tetrahidroimidazo[2,1-b]tiazol-6-il)fenil]propanamida

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

Triamtereno (diurético)



Heterociclo condensado: pirazino[2,3-*d*] pirimidina

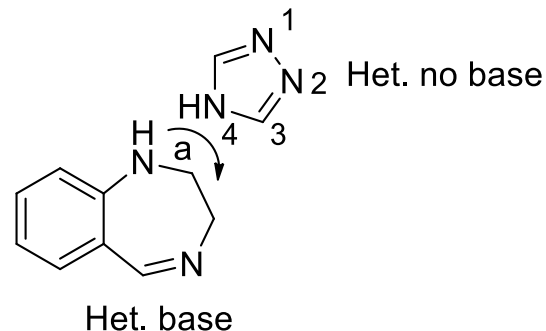
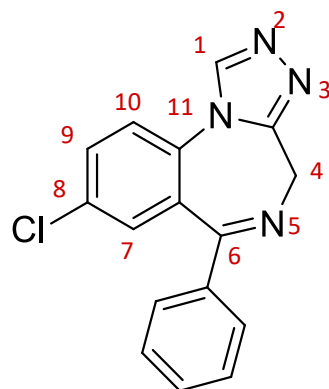
Sustituyentes: 2,4,7-triamino

6-fenil

2,4,7-triamino-6-fenilpirazino[2,3-*d*]pirimidina

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

Estazolam (hipnótico, sedante)



Heterociclo condensado: 4*H*-1,2,4-triazolo[4,3-*a*]-1,4-benzodiazepina

Sustituyentes: 6-fenil

8-cloro

8-cloro-6-fenil-4*H*-1,2,4-triazolo[4,3-*a*]-1,4-benzodiazepina

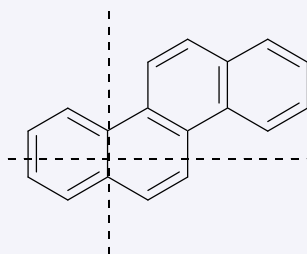
2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

REGLAS DE NUMERACIÓN

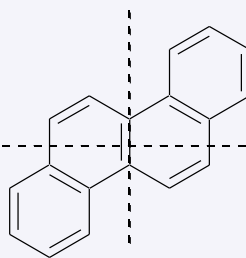
ORIENTACIÓN

o La molécula hay que situarla en un sistema de coordenadas (eje X y eje Y) de modo que cumpla tres reglas:

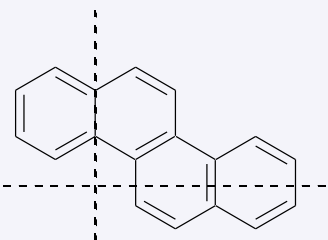
- a) El **mayor número de anillos** deben quedar en la **línea horizontal** seccionado por el eje X.
- b) El mayor número **de anillos** debe quedar en el **cuadrante superior derecho** del eje de coordenadas, situando el eje Y en el lado común a los dos anillos más a la izquierda.
- c) Cuando dos orientaciones cumplen los anteriores requisitos, se escoge la que posea el **menor número de anillos en el cuadrante inferior izquierdo**.



correcta



No cumple norma b)



erróneas

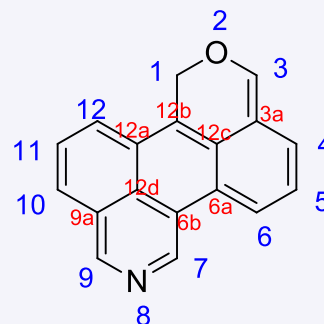
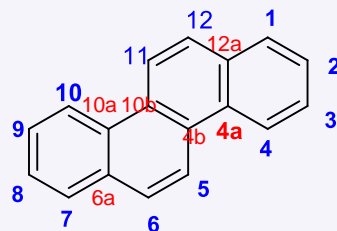
No cumple norma b)

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

REGLAS DE NUMERACIÓN

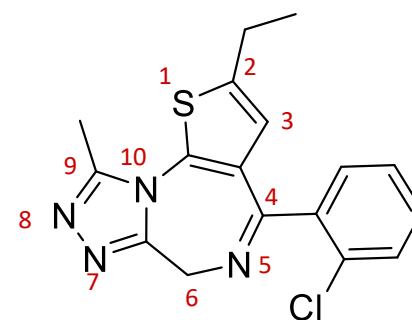
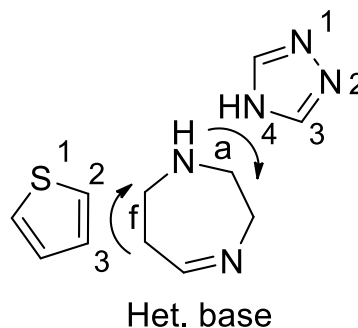
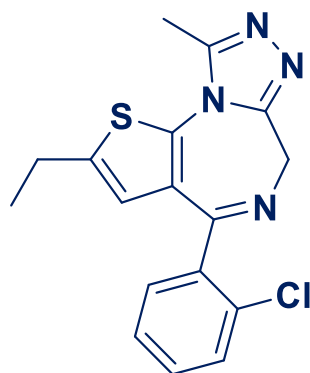
NUMERACIÓN

- Se comienza a numerar en el **sentido de las agujas del reloj**, empezando por el **átomo no participante en la condensación que quede más arriba y más a la derecha**, saltando los átomos de carbono comunes a dos anillos pero no los heteroátomos que reúnan esta condición.
- A los átomos comunes a dos o tres anillos que se encuentran en la periferia se les da el número del átomo anterior añadiendo las letras del alfabeto y siguiendo el sentido de las agujas del reloj. Para numerar los carbonos interiores se les da el número del último átomo de la periferia añadiendo las letras del alfabeto en el sentido de las agujas del reloj.



2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

Etizolam (ansiolítico)



Heterociclo condensado: 6*H*-tieno[3,2-*f*]-1,2,4-triazolo[4,3-*a*]-1,4-diazepina

Sustituyentes: 2-etil

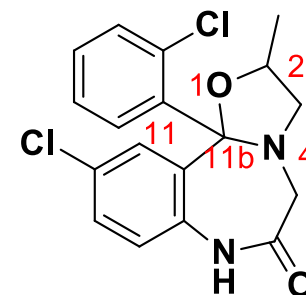
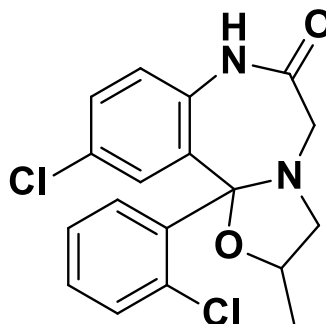
4-(*o*-clorofenil)

9-metil

4-(*o*-clorofenil)-2-etil-9-metil-6*H*-tieno[3,2-*f*]-1,2,4-triazolo[4,3-*a*]-1,4-diazepina

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

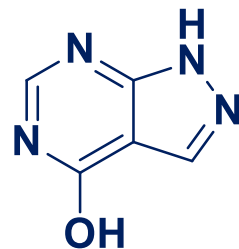
Oxazolam (ansiolítico)



10-cloro-11b-(2-clorofenil)-2-metil-5H-2,3,7,11b-tetrahidrooxazolo[3,2-d]-1,4-benzodiazepin-6-ona

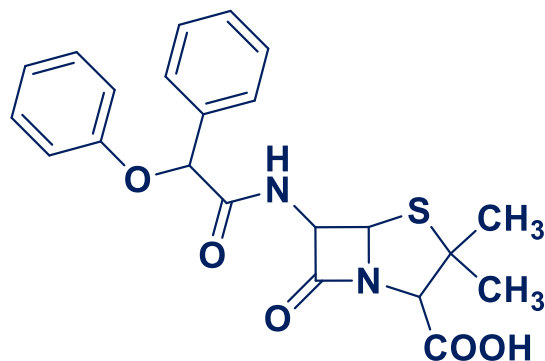
2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados

Alopurinol (tratamiento de hiperuricemia)



1*H*-pirazolo[3,4-*d*]pirimidin-4-ol

2.5. Sistemas Heterocíclicos Condensados



Ácido 6-(2-fenoxi-2-fenilacetamido)-3,3-dimetil-7-oxo-4-tia-1-azabicyclo[3.2.0]heptan-2-carboxílico