

Nomenclatura orgánica: hidrocarburos spiro

Eulogio García Alcolea
Dpto. Química Orgánica

Recibido: 20-3-85
Aceptado: 30-10-85

Organic nomenclature: Spiro hydrocarbons

Summary: The rules in this paper are based in the I.U.P.A.C., recommendations for Nomenclature of this kind of organic compounds.

The aim of this paper is to clarify as much as possible the way for naming these compounds. In all the examples shown I have tried to give to each compound its corresponding name according with the two methods established for it: The first one is preferentially used when there are not present condensed structures and the second one when they are.

Key-words: Organic nomenclature spiro hydrocarbons.

Los hidrocarburos spiro son aquellos que contienen un átomo de carbono enlazando a dos anillos, iguales o distintos, perteneciendo en consecuencia a cada uno de ellos. El átomo común se llama «átomo spiro» y la unión correspondiente «unión spiro».

Según el número de átomos spiro presentes estos hidrocarburos se clasifican en: Monospiro, dispiro, trispiro, etc., según contengan uno, dos, tres, etc., de esos átomos, siendo el número de ciclos en estos casos, dos, tres, cuatro etc.

La I.U.P.A.C. emplea dos métodos para numerar y nombrar este tipo de compuestos, los cuales vienen dados por las reglas A-41 y A-42, respectivamente.

Las numeraciones en cada uno de ellos pueden colocarse en los vértices de las estructuras ya interior o exteriormente.

En este Trabajo se han colocado exteriormente cuando las mismas se numeraban según el primer método, e inte-

riormente cuando en las mismas condiciones se hacían por el segundo método.

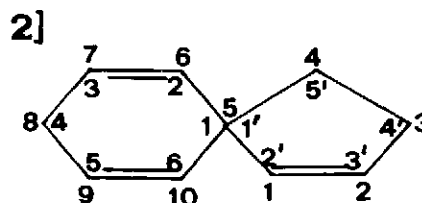
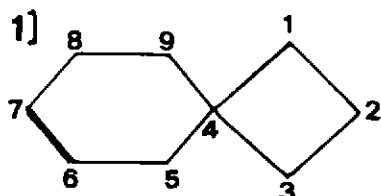
En muchas figuras y al objeto de hacer las menos repeticiones posibles de dibujos, se dan las dos numeraciones, es obvio en estos casos que las exteriores se utilizan de acuerdo con la regla A-41 y las interiores en consonancia con la regla A-42.

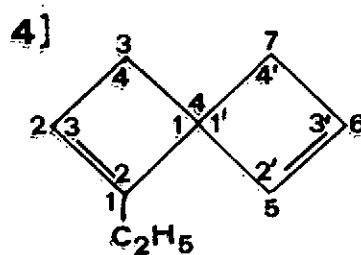
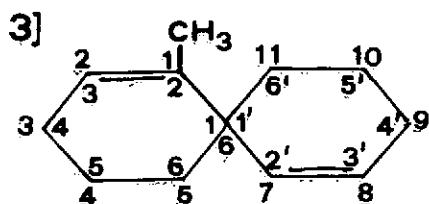
PRIMER MÉTODO

COMPUESTO MONOSPIRO

Pueden estar constituidos por dos estructuras cíclicas, dos condensadas o mezcla de ellas, las cuales pueden contener o no heteroátomos, insaturaciones o sustituyentes.

EJEMPLOS:





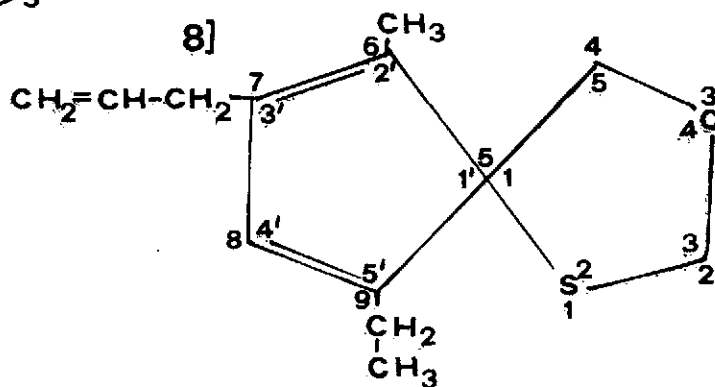
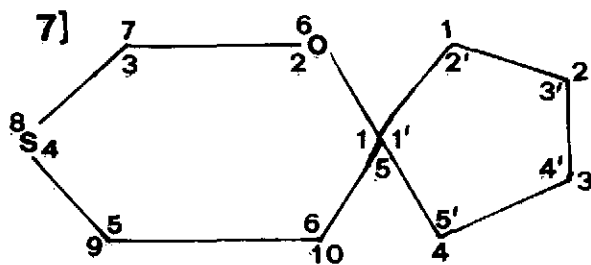
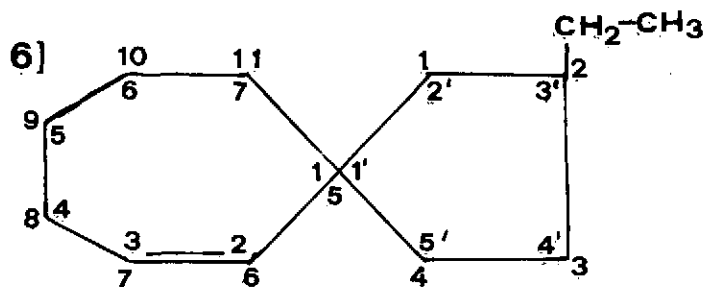
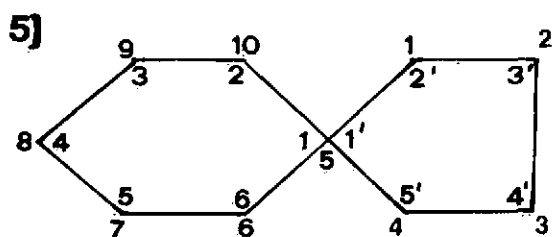
Numeración

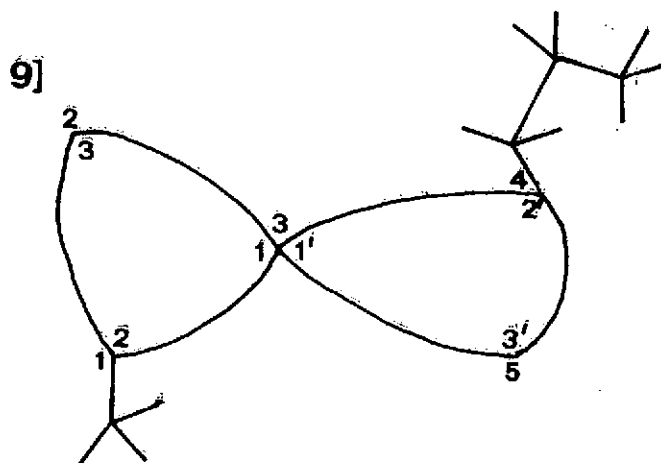
Se comienza por el átomo de carbono contiguo al átomo spiro más conveniente del ciclo más pequeño y dando la vuelta al mismo se pasa al ciclo mayor a través del átomo mencionado.

En el supuesto de que existan heteroátomos y/o insaturaciones y/o sustituyentes no funcionales se procurará, respetando la regla anterior, que el sentido de numeración dé números más bajos para ellos y en ese orden de preferencia.

Una vez numerado el compuesto, se procederá a nom-

brarlo; para ello colocaremos la voz spiro al principio, si es que no hay sustituyentes o heteroátomos; si estuyese alguno presente, el mismo con su indicador de posición encabezaría el nombre; si hubiese de los dos tipos, entonces los sustituyentes irían primero con sus indicadores y seguidamente los heteroátomos precedidos de los suyos. A continuación de la voz spiro se colocará una llave y dentro de la misma dos números, indicando cada uno los eslabones que contiene cada ciclo, no incluyendo en ellos el átomo spiro y colocando éstos en orden creciente, que es a su vez el mismo en que se numeran, y finalmente y fuera de la llave el nombre del hidrocarburo de cadena abierta del mismo número de eslabones que tiene el compuesto.





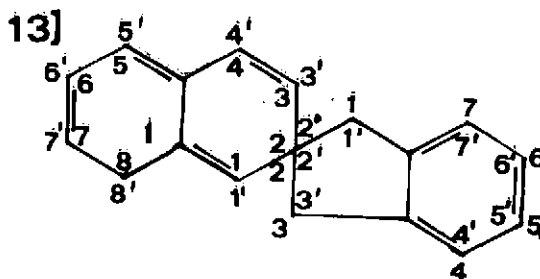
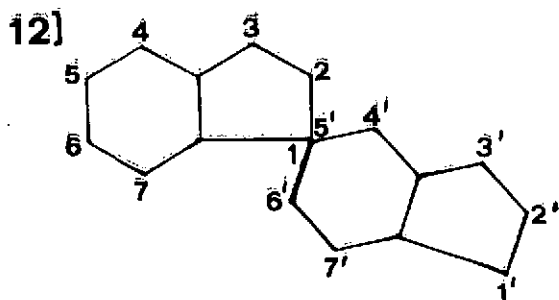
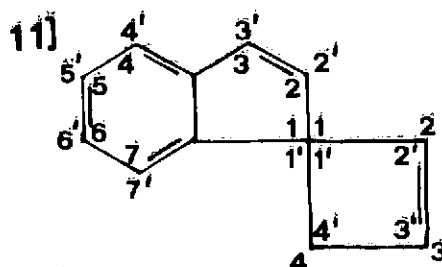
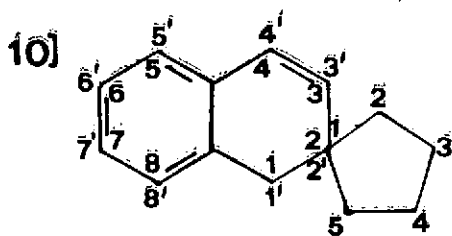
Los nombres de los compuestos 1) al 9) desarrollados en las páginas anteriores, son los siguientes:

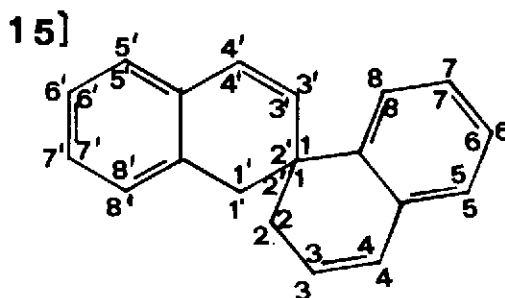
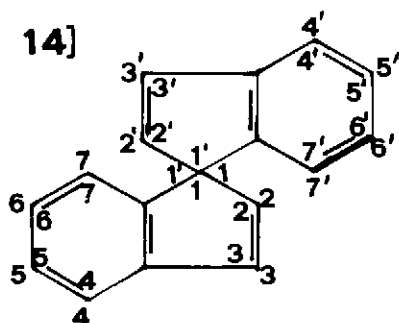
- 1) Spiro [3.5] nonano
- 2) Spiro [4.5] deca-1,6,9-trieno
- 3) 1-Metilspiro [5.5] undeca-1,7-dieno
- 4) 1-Etilspiro [3.3] hepta-1,5-dieno
- 5) Spiro [4.5] decano
- 6) 2-Etilspiro [4.6] undec-6-eno
- 7) 6-Oxa-8-tiaspiro [4.5] decano
- 8) 7-Alil-9-etil-6-metil-3-Oxa-1-tiaspiro[4.4]nona-6,8-dieno.
- 9) 1-Metil-4-propilspiro [2.2] pentano.

Si uno o ambos componentes del compuesto monospiro

es o son sistemas policiclos condensados, se respetará la numeración propia que tenga cada estructura y el conjunto se nombrará colocando en primer lugar la voz *spiro* seguida, entre barras, de los nombres de los componentes ordenados alfabéticamente; entre cada dos nombres alfabéticos se colocarán los números indicadores de unión de los dos conjuntos respecto al átomo spiro, pudiendo tener este átomo números iguales o distintos, uno de cada componente.

Si un componente no tiene numeración propia, el átomo spiro recibirá para él el número 1 ó 1', según que el componente sin numeración propia vaya o no alfabéticamente delante o detrás.





La voz *Dihidro* significa dos posiciones saturadas, equivalente a la pérdida de una insaturación doble en un compuesto que contiene el número máximo posible de dobles enlaces no acumulados.

El concepto de *Indicador de Hidrógeno*, se representa por la letra mayúscula *H*, antepuesta de un número correspondiente a la posición de saturación. Se emplea en compuestos condensados, heterociclos, entre otros, para expresar la posición o posiciones saturada/s que la estructura posee. Ver ejemplos 11 y 13.

Los compuestos anteriores numerados del 10 al 15 se nombran así:

- 10) 1', 2' -Dihidrospiro [Ciclopentano-1,2' -naftaleno]
 11) 1' H-Spiro [ciclobut-2-eno-1,1' -indeno]. Puede suprimirse aquí el 1' H, pues el 1H-indeno se nombra simplemente indeno.
 12) Perhidrospiro-1,5' -biindeno.

En este caso siendo las dos estructuras iguales, es base la que tiene el indicador de hidrógeno más bajo.

- 13) 2,2', 3,8' -Tetrahidro-1H-spiro [indeno-2,2' -naftaleno]
 14) 1,1' -Spirobiindeno
 15) 1,1', 2,2' -Tetrahidro-1,2' -spirobinaftaleno.

COMPUESTOS POLISPIRO

Pueden estar constituidos por tres o más sistemas cerrados, simples o compuestos; entre cada dos de ellos habrá un átomo spiro, por lo que si tenemos tres sistemas, esta-

rán presentes dos átomos spiro; si cuatro, tres spiro; etc.

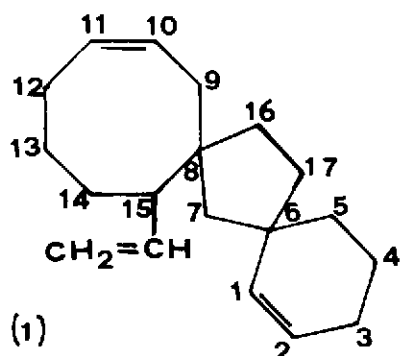
El conjunto se comenzará a numerar por el átomo de carbono más conveniente de los dos contiguos al eslabón spiro del ciclo más pequeño siguiendo por él hasta terminar de numerarlo en el átomo spiro primero; de aquí por el camino más corto del segundo ciclo hasta el átomo spiro segundo, siguiendo por la ruta más corta del ciclo tercero al tercer átomo spiro y así sucesivamente hasta llegar al último átomo spiro y por lo tanto al último ciclo, el cual se recorrerá, siguiendo por las partes no numeradas (que son semicaminos que quedan sin numerar), del penúltimo, etc. y así hasta el segundo ciclo en que se terminará.

Debe tenerse en cuenta aquí, lo dicho en los monospiro, para cuando estén presentes radicales, insaturaciones o sustituyentes.

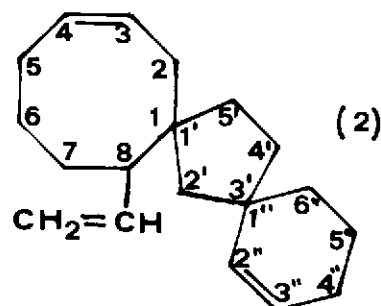
Una vez numerado el compuesto se nombrará colocando delante los sustituyentes en orden alfabético precedidos de sus indicadores: a continuación la voz que corresponda, dispiro, trispiro, etc., seguida entre barras de unos números, el primero de los cuales representa el de eslabones del ciclo pequeño, el segundo el de átomos de carbono comprendidos entre el primero y el segundo átomo spiro, por el camino más corto de los dos posibles; el tercero, igualmente entre el segundo y el tercer spiro y así sucesivamente hasta llegar al último, volviendo al principio por la parte no numerada.

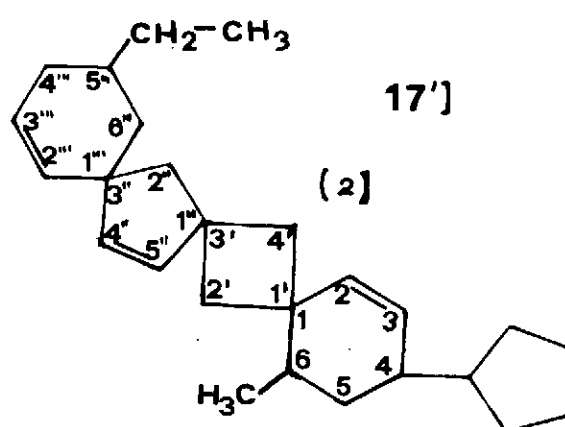
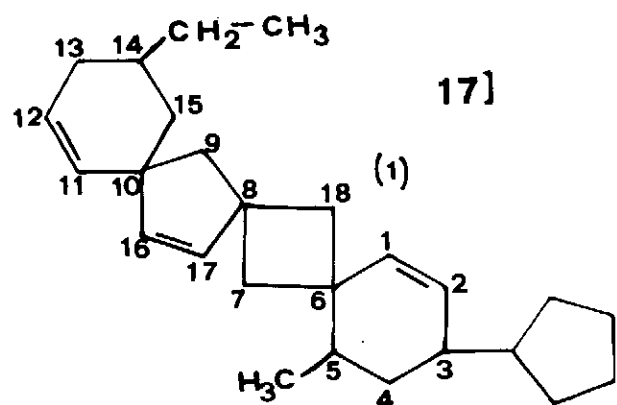
Si estuviesen presentes heteroátomos, éstos, precedidos de sus indicadores de posición, irían como prefijos de las voces spiro, dispiro, etc.

16]



16']

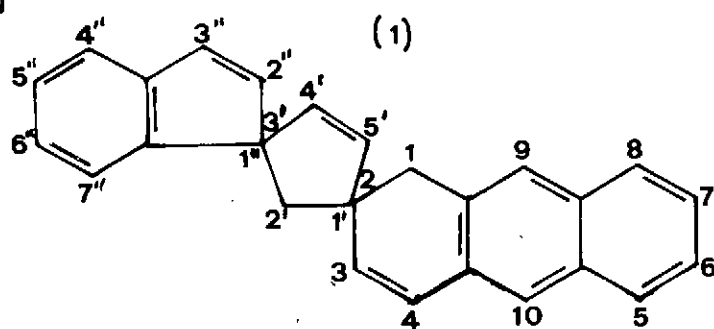




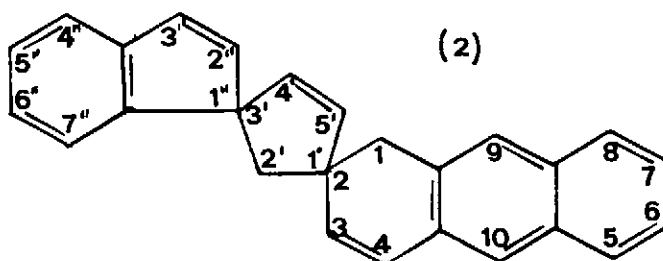
(1) Numerados de acuerdo con el primer método (Regla A-41-1).

(2) Numerados de acuerdo con el segundo método (Regla A-42).

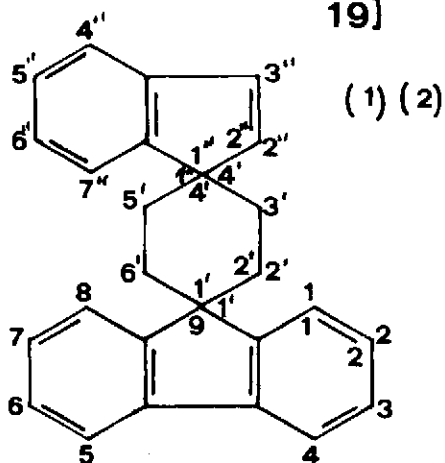
18]



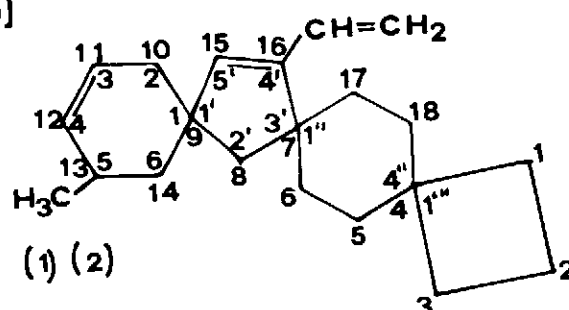
18']



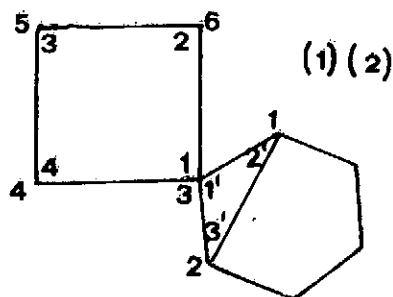
19]



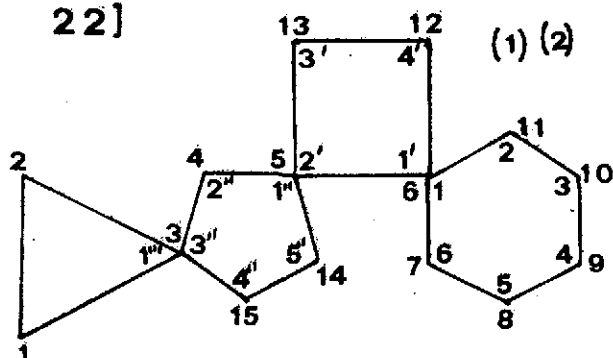
20]



21]



22]



(1) Válidas primer método y 2) Válidas segundo método

Las estructuras últimas comprendidas entre los números 16 a 22, se nombran como sigue:

16) 15-Vinildispiro [5.1.7.2.] heptadeca-1, 10-dieno.

17) 3-Ciclopentil-14-etil-5-metiltrispiro [5.1.1.5.2.1] octadeca-1,11,16-trieno.

El ciclo extremo inferior, se prefiere para números más bajos por tener mayor número de sustituyentes. En igualdad total de los ciclos extremos, también sería el preferido, porque ciclobutano unido a él está alfabéticamente antes que ciclopentano que lo está al ciclo superior del otro extremo.

18) Dispiro [antraceno-2,1'-ciclopent-4'-én-3'-1''-indeno].

19) Dispiro [fluoreno-9,1'-ciclohexano-4',1''-indeno].

20) 13-Metil-16-viniltrispiro [3.2.1.5.2.2] octadeca-11,15-dieno.

21) 1,2-Trimetilenoispiro [2.3] hexano.

22) Trispiro [2.1.0.5.2.2] pentadecano.

Obsérvese que en estos casos el orden alfabético solamente se tiene en cuenta en los componentes extremos, *antraceno* e *indeno* en el ejemplo 18 y *fluoreno* e *indeno* en el 19, eligiendo entonces, como es lógico, los primeros por empezar por *a* y *f* respectivamente y siguiendo hacia el otro extremo por intermedio de los ciclos centrales, según sea el tipo de compuesto spiro. Las numeraciones propias de cada componente, si las tiene, deben respetarse, según se dijo oportunamente.

SEGUNDO MÉTODO

COMPUESTOS MONOSPIRO

En compuestos monospiro, colocaremos después de los sustituyentes o heteroátomos, si los hubiese el componente más complejo, a continuación la voz *spiro* y finalmente el componente menos complejo. Entre componente y la voz *spiro* debe ir nexos de unión del mismo si lo precisa.

El componente más complejo tendrá numeración no primada siendo primada la del otro componente de la unión spiro.

El átomo spiro tendrá el número 1 ó 1' según que el ciclo que se numere, sea el más o el menos complejo. El sentido

de numeración será aquel para el cual los heteroátomos, insaturaciones o sustituyentes alquílicos reciban y por ese orden los números más bajos.

En el caso de componentes complejos, si éstos tienen numeración propia, les será respetada y entonces el átomo spiro recibirá el número que le corresponda en la ordenación, pudiendo o no ser el número uno.

Si uno o los dos componentes, es o son a su vez complejo/os, entonces, para elegir aquel que debe ir primero, se tendrá en cuenta lo siguiente, en orden de preferencias sucesivas:

a) Un agregado (agrupación de ciclos) tiene preferencia sobre un monociclo.

b) De dos agregados debe ser base aquel que contiene el mayor número de anillos individuales.

c) En agregados que contengan el mismo número de anillos individuales se preferirá el que contenga el anillo más largo.

d) En igualdad de todo lo anterior impera el orden alfabético.

De acuerdo con estos criterios los nombres dados para las estructuras numeradas del 1) al 15) serán ahora las siguientes:

- 1) Ciclohexanospirociclobutano
- 2) 2,5-Ciclohexadienoispiro-(2'-ciclopentano)
- 3) 2-Metil-2-ciclohexenoispiro-(2'-ciclohexeno)
- 4) 2-Etil-2-ciclobutenoispiro-(2'-ciclobuteno)
- 5) Ciclohexanospirociclopentano
- 6) 3'-Etil-2-cicloheptenoispirociclopentano
- 7) 2-Oxa-4-tiaciclohexanospirociclopentano
- 8) 3'-Alil-5'-etil-2'-metil-4-oxa-2-tiaciclopentanospiro-2',4'-ciclopentadieno
- 9) 2-Metil-2'-propilspirobicyclopropano
- 10) 1,2-Dihidronaftaleno-2-spirociclopentano
- 11) Indeno-1-spiro-2'-ciclobuteno
- 12) Perhidroispiro-1,5'-biindeno (igual que de la 1.^a forma de nombrar estos compuestos)
- 13) 2,2',3',8'-Tetrahidro-1'H-naftaleno-2-spiro-2'-indeno (1'H-puede suprimirse)
- 14) Spiro-1,1'-(biindeno)
- 15) 1,1',2,2'-Tetrahidroispiro-1,2'-binaftaleno.

COMPUESTO POLISPIRO

Si están presentes tres o más agrupaciones sencillas o compuestas o mezcla de ellas, cada una tendrá su numeración independiente, siendo no primada la del extremo más compleja y las restantes, hacia el otro extremo, serán primada prima, primada segunda, etc.

Siempre que sea posible los átomos spiro recibirán los números más bajos, respetándose como en los monospiro las numeraciones propias de los compuestos que las posean.

Teniendo en cuenta lo dicho hasta aquí los compuestos polispiro comprendidos entre el número 16' y el 22, se nombrarán como sigue de acuerdo con este segundo método.

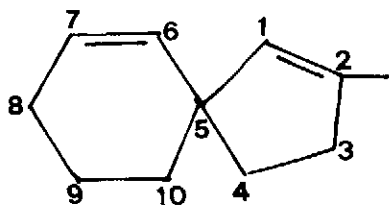
- 16') 8-Vinil-3-ciclooctenospirociclopentano-3'-spiro-2''-ciclohexeno.
 17') 4-Ciclopentil-5'''-etil-6-metil-2-ciclohexenospirociclobutano-3'-spiro-4''-ciclopentén-3''-spiro-2'''-ciclohexeno.
 18') 1,2-Dihidroantraceno-2-spiro-4'-ciclopentén-3'-spiro-1''(1''H)-indeno.
 19) Fluoreno-9-spiro-1'-ciclohexano-4'-spiro-1''(1''H)-indeno.
 20) 5-Metil-4'-vinil-3-ciclohexenospiro-4'-ciclopenteno-3'-spirociclohexano-4'-spirociclobutano.
 21) 2',3'-Trimetilciclobutanospirociclopropano.
 22) Ciclohexanospirociclobutano-2'-spirociclopentano-3''-spirociclopropano.

Debe observarse:

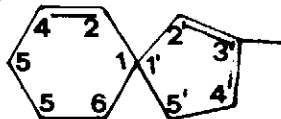
a) Que se expresan las posiciones de los indicadores de hidrógeno, aunque ellas se pueden suprimir cuando no exista duda, como ocurre en alguno de los ejemplos anteriores.

b) Las numeraciones empleadas para los compuestos nombrados según este segundo método, se han colocado normalmente en el interior de los ciclos.

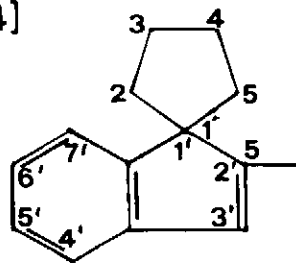
23]



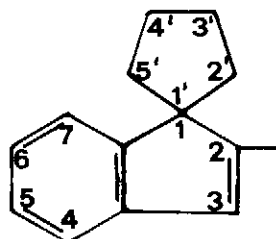
25]



24]



26]



c) Cuando los compuestos se nombran por este mismo segundo método, los indicadores de las insaturaciones que los compuestos puedan contener se anteponen al nombre, por ejemplo se escribe-2,6-decadieno (ver ejemplos 3,8, etc.). Sin embargo cuando los mismos se nombran por el primer método, esos indicadores se intercalarán en el nombre, así diremos ahora ...deca-2,6-dieno para el mismo ejemplo y así sucesivamente.

RADICALES

Los radicales derivados de compuestos spiro, se nombran siempre de acuerdo con las reglas dadas para los hidrocarburos monocíclicos y estructuras condensadas, ya que ellos pueden contener estas últimas, conteniendo la mayor parte de las primeras.

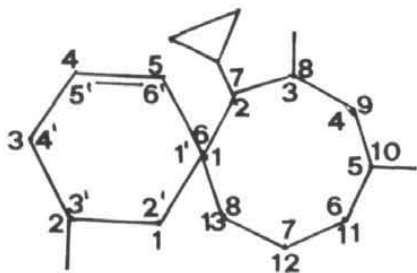
Los radicales terminarán en *il*, *ileno* o *diil*, *triil*, etc., según tengan una, dos, tres, etc., valencias libres, cada una en eslabón distinto. Si estuviesen presentes eslabones con valencias dobles, tendríamos la terminación *ilideno*, si hubiese una, *diilideno*, si hubiesen dos, etc.

En igualdad de prioridades sobre las valencias, la sencilla se preferirá a la doble para número más bajo. Si estuviesen presentes heteroátomos o si el compuesto tuviese numeración propia, la valencia no tendría prioridad en estos casos y sería el heteroátomo el que habría de tener el número más bajo o la numeración la que debería ser respetada.

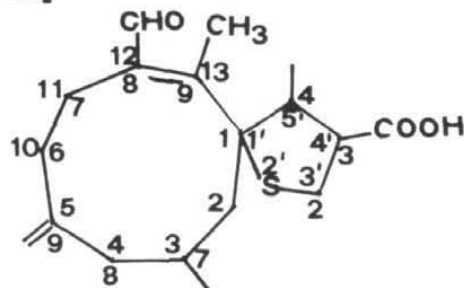
Al escribir el nombre, y al final del mismo se colocará la terminación de la sencilla/as precedida/as de sus indicadores de posición y seguidamente la de la doble/es con los suyos. Por ejemplo..... 3,4-diil-7-ilideno.

Los grupos funcionales, insaturaciones o sustituyentes alquílicos o arílicos, no tienen preferencia sobre las valencias libres a estos efectos de numeración y ellos entre sí siguen el orden dado anterior.

27]



28]

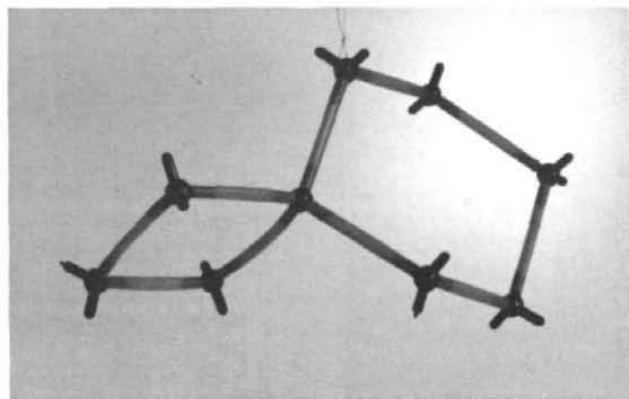


Los nombres que siguen correspondientes a los radicales 23 al 28 han sido numerados de acuerdo con el método indicado entre paréntesis al final de cada una de ellos.

Estos nombres son:

- 23) Spiro [4.5] deca-1,6-dién-2-il (Método primero)
- 24) Spiro (ciclopentano-1,1'-indeno)-2'-il (Método primero)
- 25) 2-Ciclohexenospiro-2'-ciclopenten-3'-il (Método segundo)
- 26) 1H-Indeno-1-spiro-1'-ciclopentan-2-il (Método segundo)
- 27) 7-Ciclopropilspiro [5.7] tridec-4-eno-2,8,10-triil (Método primero)
- 27) 2-Ciclopropil-ciclooctano-1-spiro-1', (5')-ciclohexeno-3,3',5-triil (Método segundo)
- 28) 3-Carboxi-12-formil-13-metil-1-tiaspiro [4,8] tridec-12-eno-4,7-diil-9-ilideno (Método primero)
- 28) 4'-Carboxi-8-formil-9-metil-8-ciclononenspiro-2'-tiaspiro [4,8] tridec-12-eno-4,7-diil-9-ilideno (Método segundo)

siendo sus sombras, sobre el plano elegido, las proyecciones obtenidas. Como este procedimiento no es suficientemente claro, se han obtenido fotografías del mismo compuesto, expresándose así mejor la posición de sus diversos componentes.



APÉNDICE

Para una mejor comprensión de estos compuestos, se han obtenido para alguno de ellos tanto proyección como fotografías.

Se han elegido por creerlos más significativos los siguientes:

Un monospiro saturado (figura 1); un monospiro no saturado (figura 2); un dispiro no saturado con ciclo central saturado, pero ahora sin el sustituyente vinilo en la posición 15 (figura 16) y finalmente un trispiro saturado (figura 22).

PROYECCIONES

El compuesto primero es, como se ve claramente, un monociclo siendo su nombre:

Spiro [3.5] nonano o ciclohexanospirociclobutano, dependiendo del método empleado para nombrar estos compuestos. Al proyectarlo sobre un plano la figura obtenida será distinta, según sean los puntos de apoyo de la misma que utilizemos. En el ejemplo que nos ocupa el foco luminoso se ha situado sobre un plano superior al del modelo,

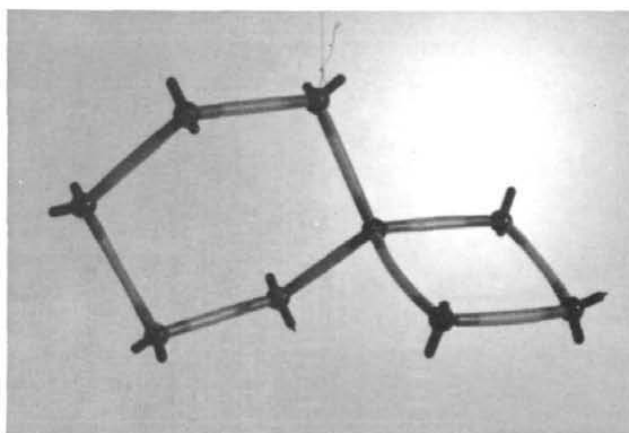
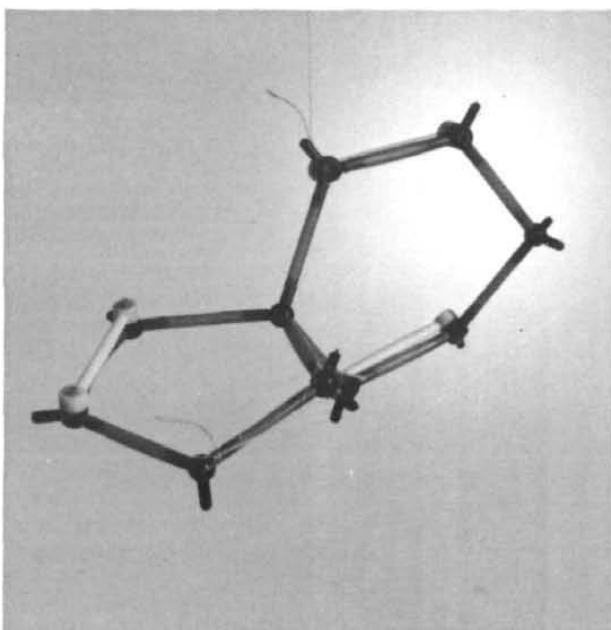
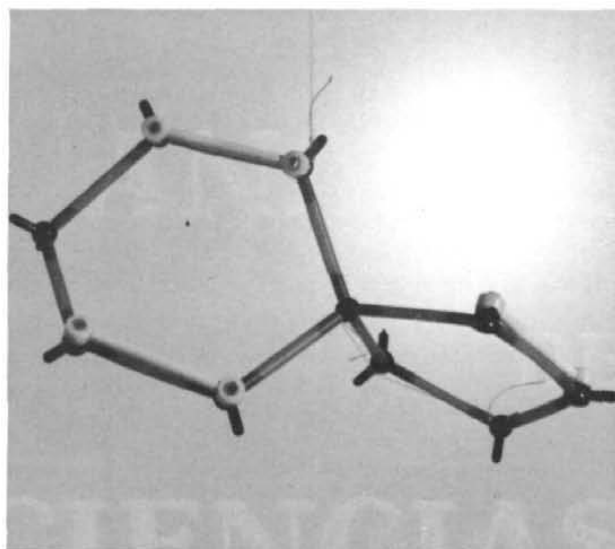


Figura 2

Se ha seguido el mismo proceso, tanto para la proyección como para la fotografía que el dicho para la figura 1, e igualmente se ha hecho para los restantes compuestos que se desarrollan en esta parte.



Observando esta segunda fotografía del compuesto 2, se ve claramente como el hecho de variar la posición al obtener la misma hace que no se vean claros los lados 4-5 del ciclopenteno y 6-7 en el ciclohexadieno.

Figura 16

De las dos fotografías obtenidas de este modelo, una la primera que se coloca es como puede observarse más clara que la colocada en segundo lugar, pero ambas se complementan para comprender mejor las posiciones en el espacio.

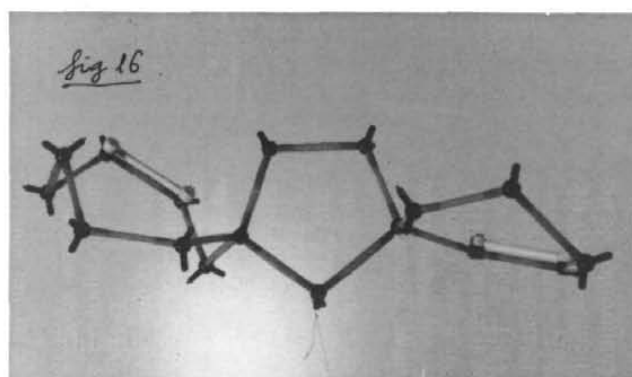
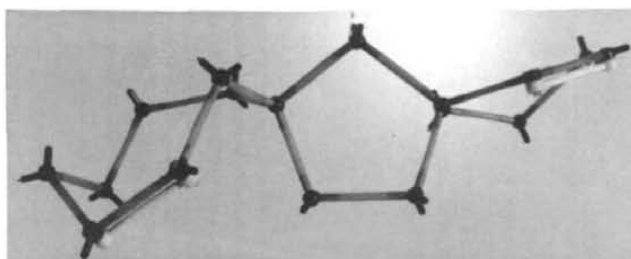
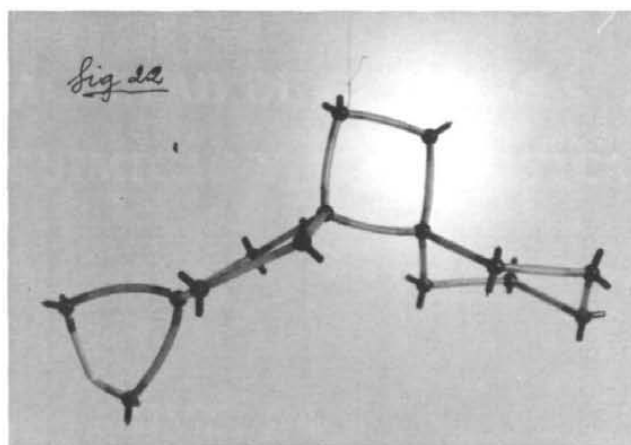
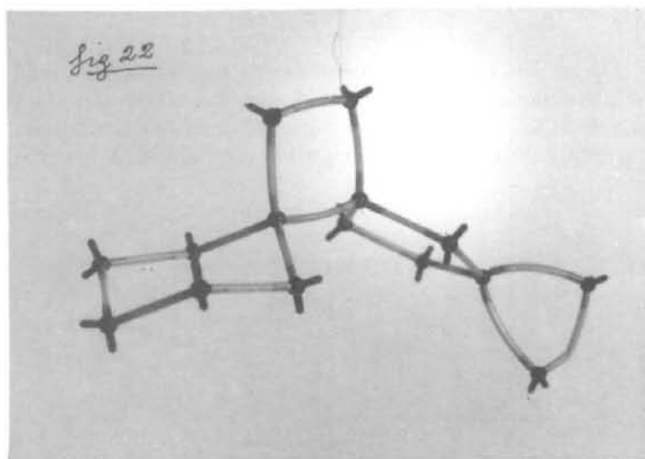


Figura 22

Es válido aquí también lo dicho en los otros ejemplos de este apéndice.



**BIBLIOGRAFÍA**

- 1 RIGAUDY, J., KLESNEY, S. P., «Nomenclature of Chemistry», 1979 Edition, Pergamon Press.
- 2 GARCÍA ALCOLEA, E., Nomenclatura de Heterociclos Vol. XXXIX-XL N.º 1-4 de Ciencias-Cursos 1980-82.
- 3 GARCÍA ALCOLEA, E., Nomenclatura de hidrocarburos policiclos fusionados, Anales de la Universidad de Murcia (en prensa).