

Adaptation française (1988) de la révision de l'extension du système de Hantzsch et Widman de nomenclature des monocycles contenant un ou plusieurs hétéroatomes *

(recommandations de 1982 **)

Ces recommandations ont été élaborées sous l'égide du Comité National de la Chimie (France) et avec l'appui financier du Conseil National de Recherches du Canada et elles ont été approuvées par les autorités compétentes de Belgique, du Canada, de France et de Suisse. Il est prévu qu'elles seront publiées simultanément (mai-juin 1989) dans les journaux de chimie de ces divers pays et qu'elles s'appliqueront dans ces territoires à partir de leur publication.

Ces recommandations, que l'on désigne par RB (pour Révision des règles B), correspondent à une révision des règles B-1, "extension du système de Hantzsch et Widman", de la section B, "systèmes hétérocycliques fondamentaux", de l'édition de 1979 des règles de l'IUPAC (1a) pour la nomenclature des composés organiques et elles les remplacent entièrement.

Cette révision est conçue de manière à fournir un système unifié permettant de nommer tous les composés monocycliques contenant un ou plusieurs hétéroatomes ne comportant pas plus de dix chaînons et dans lesquels les hétéroatomes se trouvent dans des états de valence standard définis (voir la note I).

Il est évident que le système pourrait facilement inclure tous les éléments pour lesquels un état de valence standard défini existe. Toutefois, en vue d'éviter toute confusion avec des terminologies existantes, on ne devrait l'étendre qu'avec les précautions appropriées.

Les présentes recommandations ne sont pas faites avec l'intention de remplacer les noms triviaux couramment utilisés, tels que thiophène, furane, pyrrole, pyridine et morpholine, et qui sont reconnus par la règle B-2 (référence 1b) ; toutefois, elles remplacent les noms des monocycles partiellement saturés contenant un ou plusieurs hétéroatomes pour lesquels il était nécessaire d'utiliser les terminaisons spéciales mentionnées à la règle B-1.2 (référence 1c).

Les noms des monocycles contenant un ou plusieurs hétéroatomes et plus de dix chaînons sont formés en faisant appel à la nomenclature par remplacement décrite dans la règle B-4.1 (référence 1d).

RB-1.1. - (remplace les règles B-1.1. (en partie) et B-1.51). Pour nommer un *monocycle saturé* ne contenant pas plus de cinq chaînons et ne comportant qu'un seul atome d'azote, on insère le préfixe "aza-" (voir le tableau I) - avec élision de la lettre "a" terminale du préfixe (voir note II) - devant la terminaison "-iridine", "-étidine" ou "-olidine" suivant que les cycles comportent

respectivement trois, quatre ou cinq chaînons. La numérotation commence par l'atome d'azote.

TABLEAU 1. - Préfixes pour le système de Hantzsch-Widman (voir note III).

Élément	Valence	Préfixe
Fluor	I	Fluora
Chlore	I	Chlora
Brome	I	Broma
Iode	I	Ioda
Oxygène	II	Oxa
Soufre	II	Thia
Sélénium	II	Séléna
Tellure	II	Tellura
Azote	III	Aza
Phosphore	III	Phospha
Arsenic	III	Arsa
Antimoine	III	Stiba
Bismuth	III	Bisma
Silicium	IV	Sila
Germanium	IV	Germa
Étain	IV	Stanna
Plomb	IV	Plumba
Bore	III	Bora
Mercur	II	Mercura

Note I. - On doit spécifier un état de valence lorsqu'on veut appliquer sans ambiguïté le principe du nombre maximal de doubles liaisons non cumulées.

Note II. - Dans la nomenclature organique par remplacement, la lettre "a" finale du préfixe en "a" n'est pas éliminée (réf. 1e).

Note III. Les préfixes pour les halogènes élémentaires sont inclus dans le but de fournir une façon de nommer des monocycles contenant un ou plusieurs hétéroatomes dont des atomes d'halogène cationiques (qui seront décrits dans un rapport ultérieur) ainsi que des atomes d'halogène dans des états de valence qui ne sont pas standard (référence 3).

* Ont participé à l'élaboration de ce document : M. Marcel Bohy (France, *L'Actualité Chimique*), M. Claude Combet-Farnoux (France, rédacteur de *l'European Journal of Medicinal Chemistry*), M. Jean-Marie Conia (France), M. Henri Favre (Canada, CNOC), Mme Colette Gueunier (France, Centre de recherche Roussel-Uclaf), M. Olivier Lafont (France, co-rédacteur de *l'European Journal of Medicinal Chemistry*), M. Noël Lozac'h (France, CNOC), M. Robert Panico (France, CNOC), M. Jean-Claude Richer (Canada, vice-président, CNOC), M. Jean Rigaudy (France, CNOC), M. Edmond Samuel (France, secrétaire, CNIC), M. Christian Schmitz (France, Rhône-Poulenc) et M. Pierre Vogel (Suisse, Université de Lausanne).

** Ces recommandations ont été publiées par l'IUPAC en 1983 (*Pure Appl. Chem.*, 1983, 55, 409-416).

La présence de deux atomes d'azote ou plus est indiquée par les préfixes numériques appropriés (voir RB-1.3).

La présence d'autres hétéroatomes, en plus des atomes d'azote, est indiquée par les préfixes appropriés tirés du *tableau 1*. L'ordre de citation des préfixes et la numérotation de l'hétérocycle se font en fonction des principes énoncés dans la règle RB-1.4.

TABLEAU 2. - Terminaisons pour le système de Hantzsch-Widman (voir les notes IV, V et VI).

La terminaison pour les cycles à six chaînons est fixée par l'hétéroatome le moins privilégié du cycle (voir la règle RB-1.4.), c'est-à-dire de l'hétéroatome dont le nom précède directement la terminaison.

Pour déterminer la terminaison appropriée pour les cycles à six chaînons, on choisit d'abord parmi les ensembles suivants celui qui contient l'hétéroatome de plus faible préférence avant de consulter le tableau. Par exemple, la terminaison appropriée pour le cycle dioxazine est retrouvée dans l'ensemble 6B qui contient l'élément azote.

6A	O ⁽¹⁾ , S, Se, Te, Bi, Hg
6B	N ⁽²⁾ , Si, Ge, Sn, Pb
6C	B, F, Cl, Br, I, P, As, Sb

Grandeur du cycle	Non saturé ⁽³⁾	Saturé ⁽⁴⁾
3	irène ⁽⁵⁾	irane ⁽⁶⁾
4	ète	étane ⁽⁶⁾
5	ole	olane ⁽⁶⁾
6A	ine ⁽¹⁾	ane
6B	ine ⁽²⁾	inane
6C	inine	inane
7	épine	épane
8	ocine	ocane
9	onine	onane
10	écine	écane

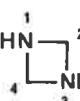
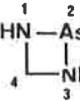
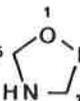
- (1) On ne doit pas utiliser "oxine" pour le pyrane parce que ce nom a été employé comme nom trivial pour le quinoléin-8-ol.
- (2) On ne peut utiliser "azine" pour la pyridine parce que ce nom a été employé depuis longtemps comme nom pour la classe des composés de formule =N-N= (référence 4).
- (3) A utiliser lorsque le cycle contient le nombre maximal de doubles liaisons non cumulées et quand le cycle contient au moins une double liaison lorsque les hétéroatomes possèdent les valences données dans le *tableau 1* (voir aussi la note 4).
- (4) A utiliser lorsque aucune double liaison n'est présente ou lorsqu'une telle présence est impossible.
- (5) La terminaison "-irine" qui a été utilisée d'une façon traditionnelle peut être employée lorsque le cycle ne contient que de l'azote.
- (6) Les terminaisons traditionnelles "-iridine", "-étidine" et "-olidine" doivent être utilisées d'une façon préférentielle lorsque les cycles contiennent de l'azote et ces usages sont codifiés dans la règle RB-1.1.

Note IV - La lettre "e" terminale des terminaisons qui n'est qu'optionnelle en anglais est obligatoire en français.

Note V - On peut considérer que les terminaisons indiquant les grandeurs des cycles à 3, 4, 7, 8, 9 et 10 sont dérivées des préfixes numériques suivants : "ir" de tri, "ét" de tétra, "ep" de hepta, "oc" de octa, "on" de nona et "ec" de deca.

Note VI - Les terminaisons "-étine" et "-oline" qui seraient en accord avec les autres terminaisons s'appliquant à des cycles insaturés ne peuvent pas être utilisées ici parce qu'elles ont été employées antérieurement pour nommer respectivement les cycles à quatre et à cinq chaînons contenant de l'azote et possédant une seule des deux doubles liaisons possibles (référence 1c).

Exemples

1.  Aziridine
2.  1,3-Diazétidine
3.  1,3,2-Diazarsétidine
4.  1,4,2-Oxazaphospholidine

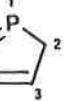
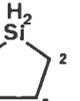
Remarque : cette recommandation n'a pas pour but d'éliminer les noms triviaux reconnus par la règle B-2 (référence 1b), comme pyrrolidine ou imidazolidine.

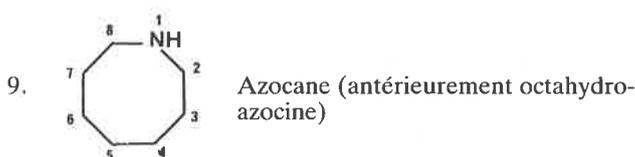
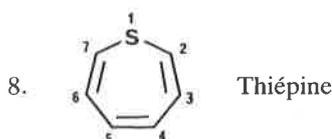
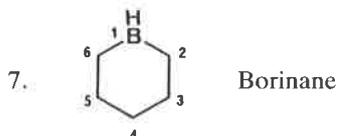
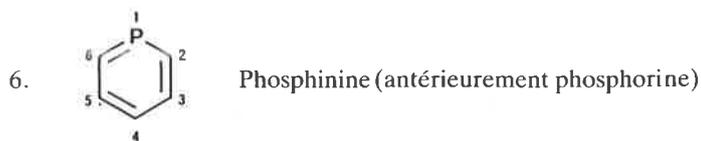
RB-1.2. (remplace les règles B-1.1 (en partie) et B-1.51). Le nom d'un monocycle ne comportant pas plus de dix chaînons, dont l'un est un hétéroatome mentionné dans le tableau 1, est formé en combinant le préfixe approprié spécifié dans le tableau 1 avec une terminaison tirée du *tableau 2* - excepté dans les cas mentionnés dans la règle RB-1.1 ; on procède à l'élimination de la lettre "a" terminale du préfixe lorsqu'il est suivi d'une voyelle (voir note II).

Dans un monocycle insaturé comportant le nombre maximal de doubles liaisons non cumulées et au moins un atome relié aux atomes adjacents du cycle uniquement par des liaisons simples, on utilise la technique de l'hydrogène indiqué pour marquer la présence d'un atome d'hydrogène sur cet atome (voir les exemples 2 et 4 ci-dessous) (référence 2).

La numérotation de l'hétérocycle commence par l'hétéroatome. Ensuite, l'hydrogène indiqué a préséance pour la détermination des indices les plus bas.

Exemples

1.  Oxirane
2.  1H-Azirène
1H-Azirine (traditionnel)
3.  Azète
4.  2H-Phosphole
5.  Silolane

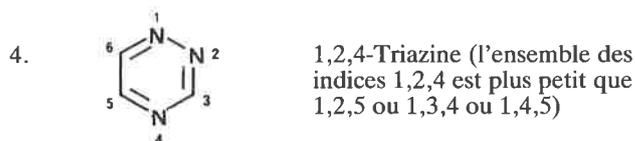
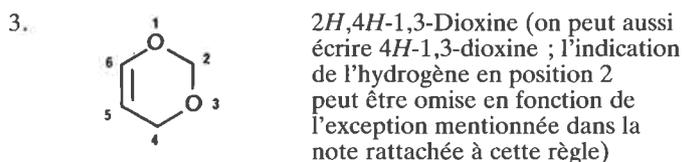
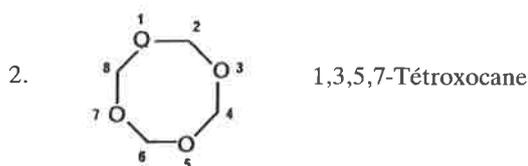
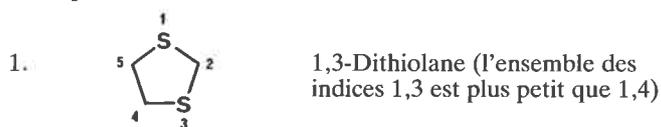


RB-1.3. – (remplace les règles B-1.3 et B-1.52). Lorsqu'un monocycle contient plusieurs hétéroatomes identiques, on indique la présence de ceux-ci en combinant un préfixe numérique, tel que "di-", "tri-", etc., au préfixe désignant l'hétéroatome (*tableau 1*). On procède à l'élision de la lettre "a" terminale d'un préfixe numérique lorsqu'il est suivi d'une voyelle.

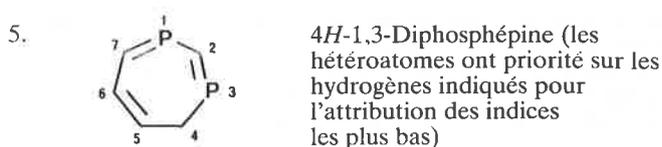
Les positions des hétéroatomes sont indiquées par des indices numériques qui sont cités devant le nom. La numérotation commence par un hétéroatome et elle procède dans la direction qui donne l'ensemble le plus bas pour les indices des hétéroatomes (voir note VII).

Remarque : on peut omettre de désigner des atomes d'hydrogène par la technique de l'hydrogène indiqué (voir règle RB-1.2) lorsqu'ils sont sur des positions du cycle qui se trouvent entre deux atomes bivalents du cycle.

Exemples



Note VII - L'ensemble le plus bas est celui qui comporte l'indice le plus bas à l'occasion de la première différence qui apparaît lorsqu'on compare des ensembles contenant le même nombre d'indices terme à terme à partir du début (référence 4a).



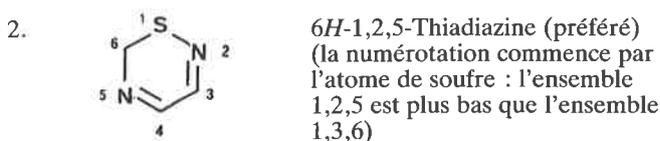
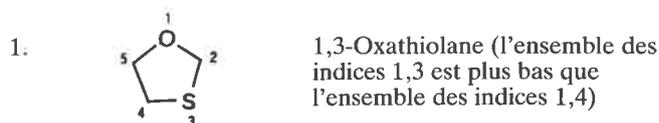
RB-1.4. – (remplace les règles B-1.4 et B-1.53). Le nom d'un monocycle contenant plusieurs hétéroatomes différents est formé en combinant à la terminaison appropriée (règles RB-1.1 et RB-1.2) les préfixes désignant chacun des hétéroatomes (*tableau 1*) accompagnés, s'il y a lieu, des préfixes numériques prescrits par la règle RB-1.3 et placés dans l'ordre de leur apparition dans le tableau 1 (voir note VIII).

On procède à l'élision de la lettre "a" finale du préfixe numérique lorsqu'il est suivi d'une voyelle.

Les positions des hétéroatomes sont indiquées par des indices numériques qui sont tous cités avant le premier préfixe désignant les hétéroatomes et dans le même ordre que les préfixes des hétéroatomes auxquels ils se réfèrent.

La numérotation du monocycle hétéroatomique commence par l'hétéroatome dont le préfixe apparaît le premier dans le *tableau 1*. Si plusieurs choix existent, la numérotation doit être effectuée de façon à attribuer l'ensemble d'indices le plus bas (voir la note VII de la règle RB-1.3) d'abord à l'ensemble de tous les hétéroatomes et, si un choix subsiste, aux hétéroatomes dans l'ordre des préfixes correspondants.

Exemples



Il faut noter que la numérotation commençant par l'un ou l'autre des atomes d'azote adjacents de l'atome de carbone portant une liaison simple conduit au même ensemble le plus petit, 1,2,3,4, pour les quatre hétéroatomes pris dans leur ensemble, sans tenir compte de leur priorité. La direction de la numérotation dépend donc de la comparaison de ces deux ensembles d'indices dans l'ordre de citation des hétéroatomes, soit 1,3,4,2 et 1,2,4,3 ; le deuxième indice de ce dernier ensemble est le plus petit et cet ensemble est donc choisi.

RB-1.5. – (remplace les règles B-1.2) (voir la note IX). Pour nommer un monocycle contenant un ou plusieurs hétéroatomes et comportant moins que le nombre maximal de doubles liaisons non cumulées on peut :

(a) soit ajouter des préfixes "dihydro-", "tétrahydro-", etc., au

Note VIII - Cet ordre de citation est conforme à la séquence des éléments qui est maintenant recommandée tant dans les règles de nomenclature de la chimie inorganique (référence 6) qu'organique (référence 7).

Note IX - Il en résulte que les terminaisons spéciales suggérées dans la règle B-1.2 (référence 1c) pour les hétérocycles partiellement saturés ne sont maintenant plus recommandées.

nom du composé fondamental contenant le nombre maximal de doubles liaisons non cumulées ;

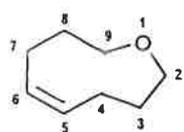
(b) soit ajouter des préfixes "didéhydro-", "tétradéhydro-", etc., au nom du composé fondamental possédant une structure complètement saturée et obtenu par application des règles C-16.1 et C-41.2 (référence 5).

Lorsqu'on détermine l'origine et le sens de la numérotation, les hétéroatomes et les hydrogènes indiqués ont priorité sur les préfixes "hydro-" et "déhydro-".

Remarque : devant une autre voyelle, on ne procède pas à l'élimination de la lettre "o" terminale d'un préfixe "hydro-" ou "déhydro-".

Exemples

1.  (a) 1,2-Dihydroazète
(b) 2,3-Didéhydroazétidine (antérieurement Δ^2 -azétine ou 2-azétine)
2.  (a) 3,6-Dyhydro-2*H*-phosphépine
(b) 1,2,4,5-Tétradéhydrophosphépane

3.  (a) 2,3,4,7,8,9-Hexahydrooxonine
(b) 5,6-Didéhydrooxonane

Références

- [1] International Union of Pure and Applied Chemistry, "Nomenclature of Organic Chemistry", Sections A, B, C, D, E, F, and H, 1979 edition, Pergamon Press, Oxford, 1979 : [a] pp. 53-55 ; [b] pp. 55-63 ; [c] Rule B-1.2, exception, p. 54 ; [d] p. 68 ; [e] p. 83.
[2] Reference 1, Section A, Rule A-21.6, p. 25.
[3] International Union of Pure and Applied Chemistry, "Treatment of Variable Valence in Organic Nomenclature (Lambda Convention)", (Recommandations 1983), *Pure Appl. Chem.*, 1984, 56, 769-778.
[4] Reference 1, Section C, Rule C-923.1, p. 289.
[5] Reference 1, Section C, pp. 108, 115-116.
[6] International Union of Pure and Applied Chemistry, "Nomenclature of Inorganic Chemistry (1970)", 2nd edition, Butterworths, London, 1971, Table IV, p. 104.
[7] Reference 1, Section D, Appendix, Table I, pp. 459-560.