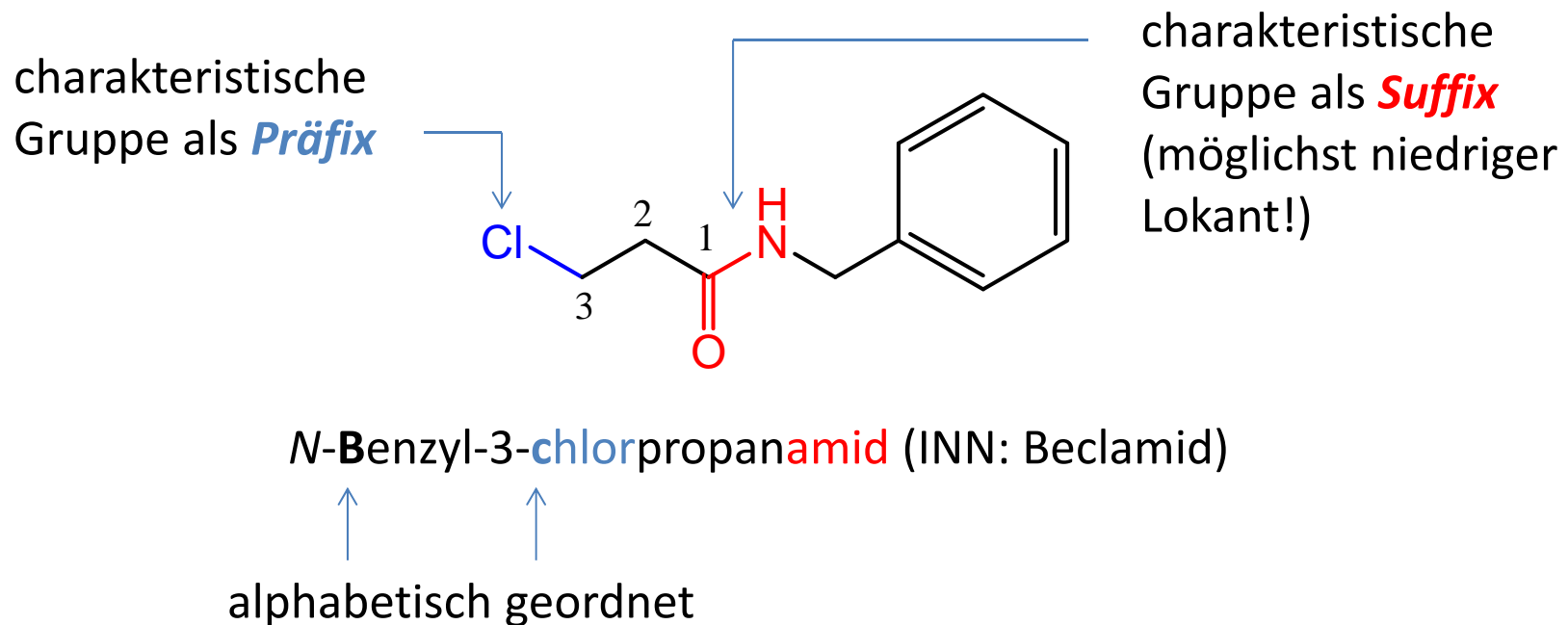


4. Substitutive Nomenklatur

Benötigt, wenn Wasserstoffatome der Stammstruktur durch Substituenten (= Atome oder Atomgruppen) ersetzt werden



Entscheidend für die Wahl als Präfix oder Suffix ist die **Priorität der charakteristischen Gruppe!**

4.1 Priorität der wichtigsten Verbindungsklassen

1. Radikale und Ionen
2. Carbonsäuren, Sulfonsäure
3. Säurederivate: Anhydride, Ester, Halogenide, Amide
4. Nitrile (Cyanide), Isocyanide
5. Aldehyde, Thioaldehyde, Aldehydderivate
6. Ketone, Thioketone, Ketonderivate
7. Alkohole/Phenole, Thioalkohole
8. Amine, Imine, Hydrazine
9. Ether, Sulfide
10. Peroxide
11. Halogenide: F, Cl, Br, I

Priorität

Priorität

4.2 Präfixe und Suffixe wichtiger charakteristischer Gruppen

siehe Zusatzblatt für Übersicht!

4.2 Präfixe und Suffixe wichtiger charakteristischer Gruppen

Wichtige charakteristische Gruppen, die nur als Präfixe auftreten

-OR -SR	Alk(yl)oxy-/Aryloxy- Alkylsulfanyl- (alt: alkylthio-)
-N ₃	Azido-
-NHOH -NHNH ₂	Hydroxylamino- Hydrazino-
-F, -Cl, -Br, -I	Fluor-, etc.
-NO ₂ -NO	Nitro- Nitroso-
-OCN -NCO -SCN -NCS	Cyanato- Isocyanato- Thiocyanato- Isothiocyanato-

4.3 Wichtige Trivialnamen

Carbonsäuren: Trivialnamen der gesättigten Carbonsäuren C1 - C6 und der gesättigten Dicarbonsäuren C2 - C6, Benzoesäure, Salicylsäure, Phthalsäure, Terephthalsäure, Zimtsäure, Nicotinsäure, Isonicotinsäure, Milchsäure, Weinsäure, Citronensäure, Glyoxylsäure, Brenztraubensäure, Acetessigsäure, Oxalessigsäure, Maleinsäure, Fumarsäure, Acrylsäure, Crotonsäure, Glycin, Alanin, Cystein, Tryptophan, Prolin, Anthranilsäure, Sulfanilsäure, Lactat, Succinat, Tartrat.

Lactone: γ -Butyrolacton, γ - und δ -Valerolacton, Cumarin, Phthalid.

Aldehyde: Form- bis Butyraldehyd, Crotonaldehyd, Benzaldehyd, Zimtaldehyd, Anisaldehyd, Nicotinaldehyd, Salicylaldehyd, Furfural, Vanillin, Glycerinaldehyd, Glyoxal, Acrolein.

Ketone: Aceton, Aceto-, Benzo-, Propio- und Butyrophenon, Desoxybenzoin, Benzoin, Benzil.

4.3 Wichtige Trivialnamen

Alkohole, Phenole: Allyl-, Benzylalkohol, Benzhydrol, Ethylenglykol, Diethylenglykol, Propylenglykol, Glycerin, Glycerol, o-, m-, p-Kresol, α -, β -Naphthol, Brenzkatechin, Resorcin, Hydrochinon, Pikrinsäure.

Ether: Anisol, Ethylenoxid, Propylenoxid, THF, Dioxan.

Stickstoff-Verbindungen: Anilin, Triethanolamin, Benzidin, α -, β -, γ -Picolin, Piperazin, Harnstoff, Thioharnstoff, Guanidin, Phenylurethan

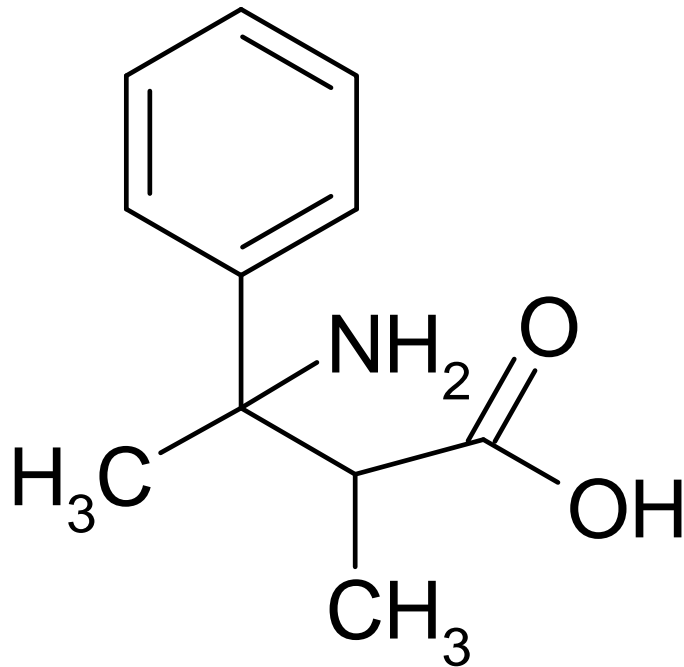
Halogenverbindungen: Methylenchlorid, Chloroform, Iodoform, Tetrachlorkohlenstoff, Benzalchlorid, Phosgen, Epichlorhydrin, Benzoyl-, Acetyl-, Tosylchlorid, -triflat.

4.4 Beispiel: Strukturformel gesucht

6-Dimethylamino-4,4-diphenyl-heptan-3-on

1. Aufsuchen des Suffixes:
2. Festlegung des Verbindungsstammes:
3. Teilstruktur: Stamm und Suffix
4. Nummerierung
5. Präfixe
6. Formel

4.4 Beispiel: Verbindungsname gesucht



1. Ranghöchste funktionelle Gruppe:

2. Verbindungsstamm:

3. Stamm und Suffix:

4. Aufsuchen der Substituenten:

5. Nummerieren

6. Zusammensetzung des Namen:

4.5 Charakteristische Gruppen

Carbonsäuren und verwandte Säuren

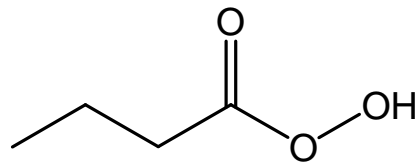
Zwei Suffixe sind möglich: „-säure“ oder „-carbonsäure“

Carboxy-C ist Bestandteil
des Stammnamens

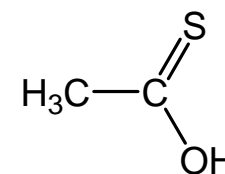
Carboxy-C ist nicht Bestandteil
des Stammnamens

Eine analoge Schreibweise existiert für *Nitrile*, *Aldehyde*, *Amide* und *Hydrazide*!

3-(Carboxymethyl)octandisäure



Thioessig-S-säure



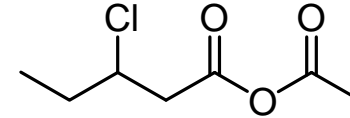
Thioessig-O-säure

4-Methylbenzen-
sulfonsäure

4.5 Charakteristische Gruppen

Anhydride

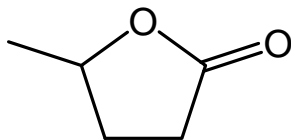
Essigsäureanhydrid



Ester und Lactone

Ethyl-2-(4-chlorphenoxy)-2-methylpropanoat
2-(4-chlorphenoxy)-2-methylpropansäure-
ethylester (INN: Clofibrat)

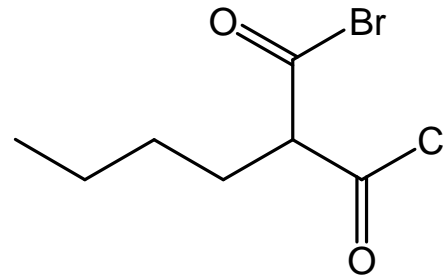
[3-(Methoxycarbonyl)-4-
(propanoyloxy)phenyl]essigsäure



Lacton = zyklischer Ester

4.5 Charakteristische Gruppen

Säurehalogenide



Pentandioylbromidiodid

Amide

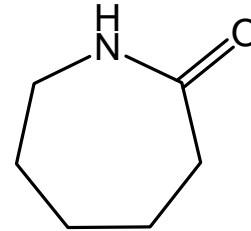
5*H*-Dibenzo[*b,f*]azepin-5-carbamid
(INN: Carbamazepin)

4-[4-(4-Chlorphenyl)-
4-hydroxypiperidino]-
N,N-dimethyl-2,2-diphenylbutanamid
(INN: Loperamid)

4.5 Charakteristische Gruppen

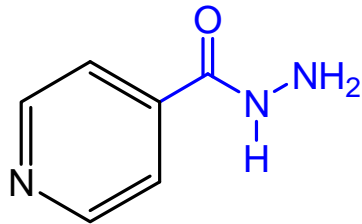
Hydroxamsäuren, Lactame, Hydrazide, Imide

Hydroxamsäure

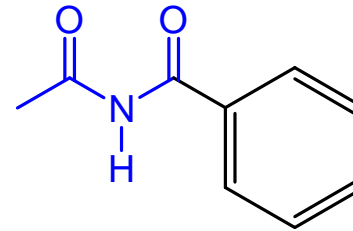


Lactam =
zyklisches Amid

N-Hydroxypyridin-2-carbamid



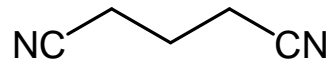
Hydrazid



Imid

4.5 Charakteristische Gruppen

Nitrile



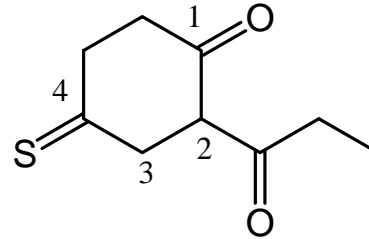
Aldehyde

5-Butyl-3-methyl-2-(prop-1-en-1-yl)hexandial

4-Formyl-2-(3-oxopropyl)-1,3-thiazol-5-carbonsäure

4.5 Charakteristische Gruppen

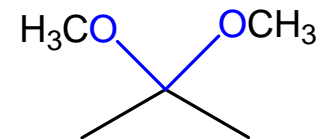
Ketone



1,5-Dimethyl-2-phenyl-2,3-dihydro-
1H-pyrazol-3-on (INN: Phenazon)

Acetale und Ketale

Acetal

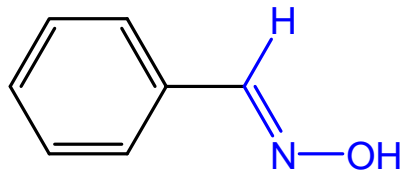


Ketal

1-Ethoxy-1-methoxypropan
Propanalethylmethyloacetal

4.5 Charakteristische Gruppen

Oxime und Hydrazone

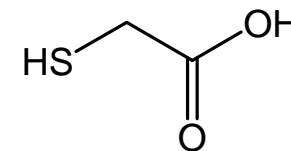


Oxim

Hydrazon

Propanalisopropylidenhydrazon
Propanal-*N*-isopropylidenhydrazon

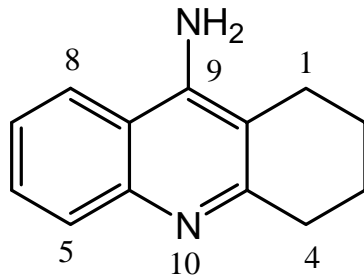
Alkohole und Thiole



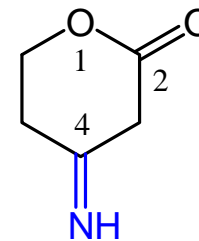
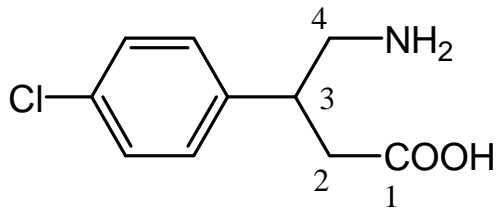
3-(4-Phenylpiperazin-1-yl)-propan-
1,2-diol (INN: Levodropropizin)

4.5 Charakteristische Gruppen

Amine und Imine



3-(10,11-Dihydro-5*H*-dibenzo[b,f]azepin-5-yl)-*N,N*-dimethylpropan-1-amin
(INN: Imipramin)



Imin

4.5 Charakteristische Gruppen

Hydroxylamine und Hydrazine

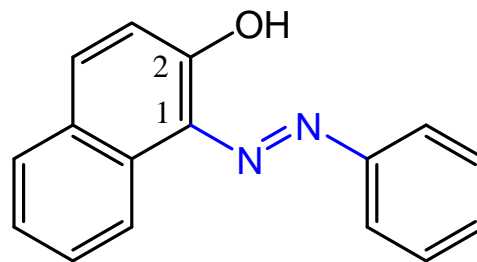
Hydroxylamin

Hydrazin

N-Methyl-*O*-phenyl-hydroxylamin

3-Hydrazino-1,2-oxazol-5-sulfonamid

Azoverbindungen

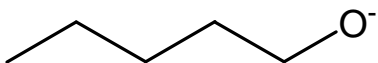


Azogruppe

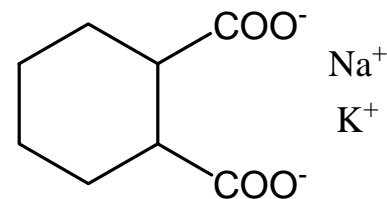
Interpretiert als Derivat des
Diazens: $\text{H}-\text{N}=\text{N}-\text{H}$

4.5 Charakteristische Gruppen

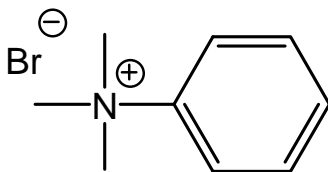
Alkolate, Phenolate, Carboxylate, Sulfonate



6-Sulfonatohexanoat



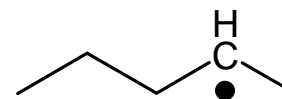
Kationen



1-Methylpyridin-1-ium

Radikale

Benennung entspricht der von Substituenten.



Pentan-2-yl

5. Additive Nomenklatur

Präfixe und Endungen beschreiben die **Addition** von Atomen oder Atomgruppen an eine Teilstruktur.

Präfix/Endung	Bedeutung
---------------	-----------

-ium

Addition von H^+

dihydro-

Addition von H_2

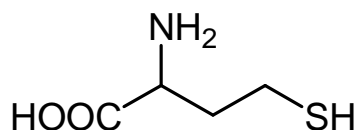
-oxid

Addition von O an DB

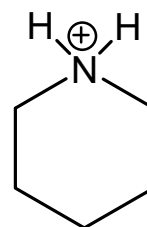
Addition von O an HA

homo-

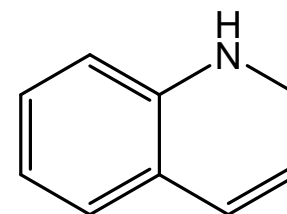
Verlängerung um CH_2



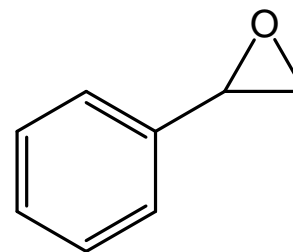
Homocystein



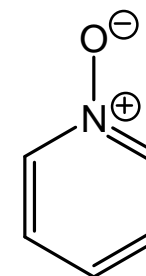
Piperidinium



1,2-Dihydrochinolin



Styrenoxid

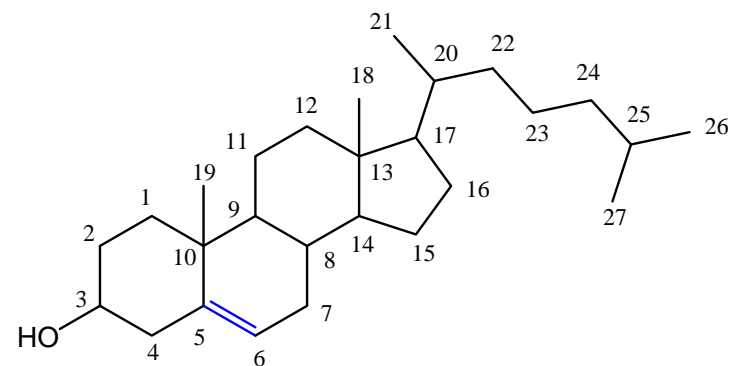
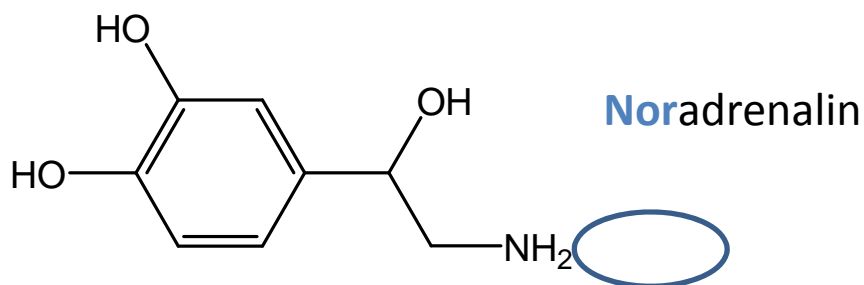


Pyridin-1-oxid

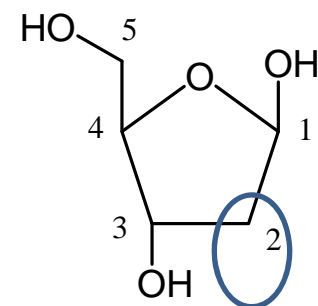
6. Subtraktive Nomenklatur

Präfixe und Endungen beschreiben die **Abspaltung** von Atomen oder Atomgruppen an eine Teilstruktur.

Präfix/Endung	Bedeutung
-en / -in	Doppel-/Dreifachbindung
dehydro-	Abspaltung von H ₂
des-	Abspaltung der nachfolgenden Gruppe
nor-	Entfernung von CH ₃
anhydro-	Intramolekulares Anhydrid



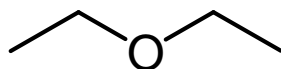
Cholest-5-**en**-3 β -ol = Cholesterol



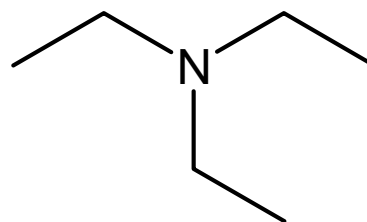
Desoxyribose

7. Radikofunktionelle Nomenklatur

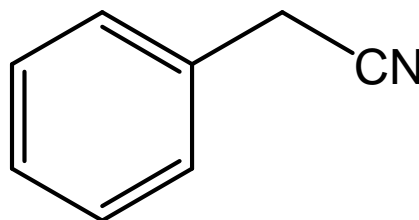
Die Verbindungsklasse der ranghöchste charakteristische Gruppe wird als „Stammsystem“ verwendet und die anderen Gruppen als „Substituenten“ betrachtet .



Diethylether
Substitutiv: Ethoxyethan



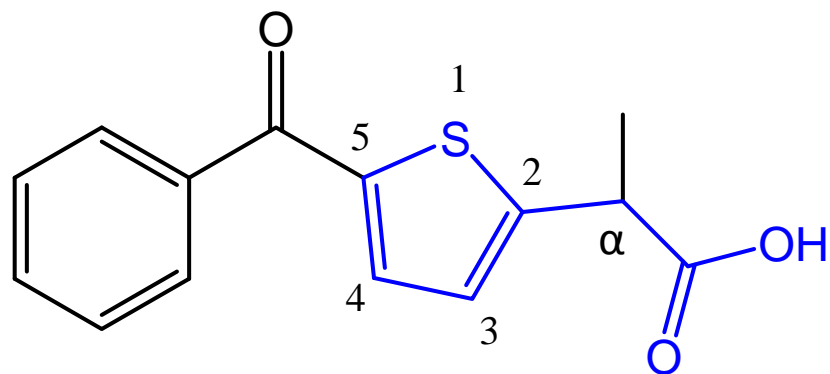
Triethylamin



Benzylcyanid
Substitutiv: Phenylethannitril

7. Konjunktive Nomenklatur

Ein Ringsystem mit substituierter Kette und charakteristischer Gruppe wird als **Grundkörper** angesehen



5-Benzoyl-α-methyl**thiophen-2-essigsäure**

Substitutiv: 2-(5-Benzoyl-2-thienyl)propansäure

INN: Tiaprofensäure

8. Ergänzungen zur Nomenklatur von komplexen Verbindungen

Wie wird das Stammsystem in komplexen Verbindungen bestimmt?

Durch Kombination der bisherigen Regeln! Aber welche Reihenfolge gilt?

1. System mit der am häufigsten vorkommenden *ranghöchsten charakteristischen Gruppe*
2. Bei der Wahl zwischen *Kette* und *Ring* wird das System mit den *meisten Substituenten* genommen.

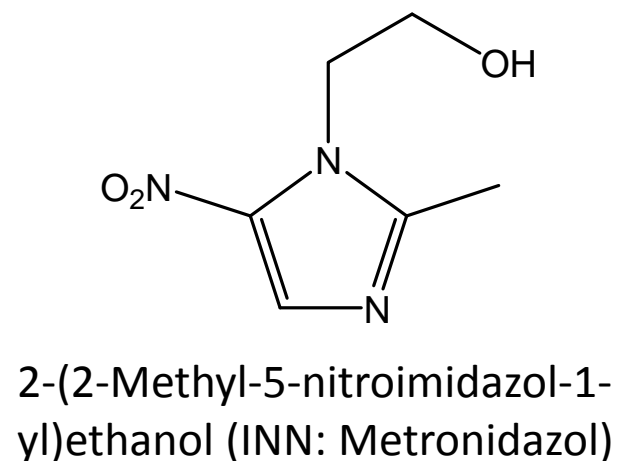
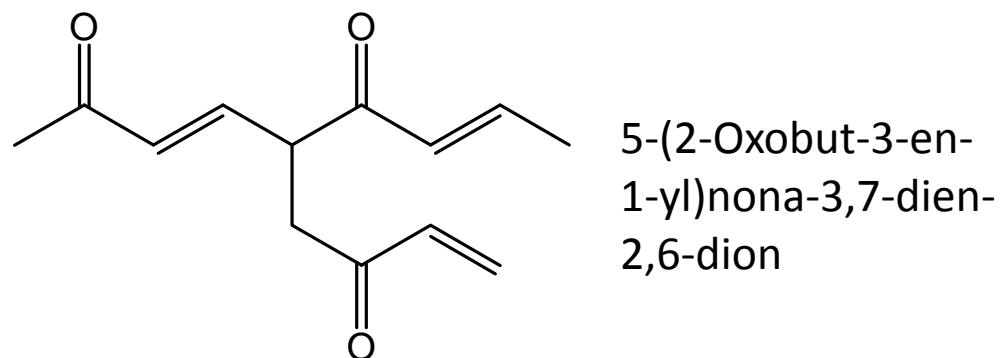
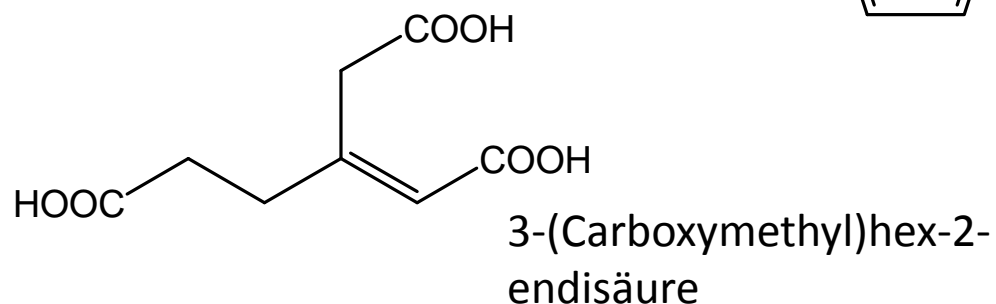
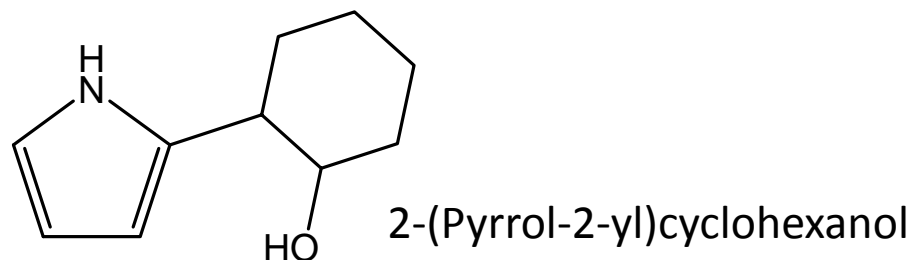
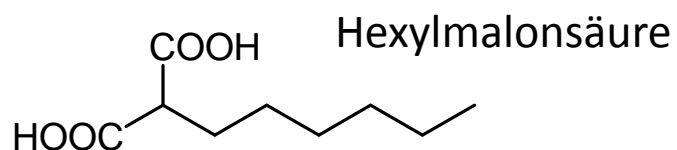
Ketten, ...

3. ... mit den meisten Heteroatomen
4. ... den meisten Mehrfachbindungen
5. ... der größten Länge
6. ... den meisten Atomen des ranghöchsten Heteroatoms
7. ... den meisten Doppelbindungen
8. ... den niedrigsten Lokanten für den Suffix

Für *Ringe* gelten weiterführend die Regeln für Heterozyklen!

8. Ergänzungen zur Nomenklatur von komplexen Verbindungen

Welche Regel bestimmt die Wahl des Stammsystems?

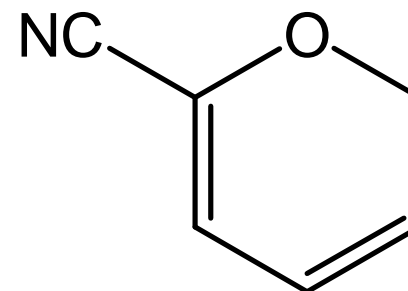
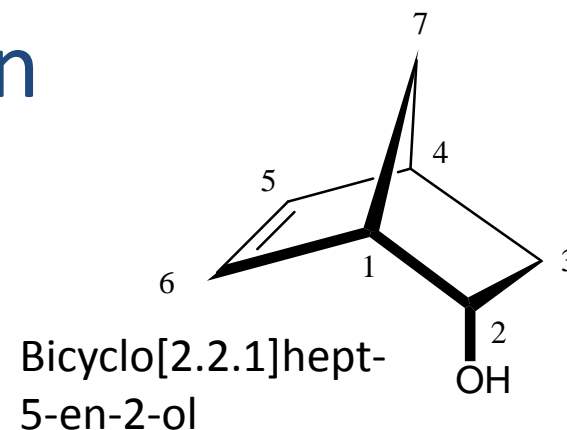


8. Ergänzungen zur Nomenklatur von komplexen Verbindungen

Regeln zur Nummerierung des Stammsystems

Möglichst niedere Lokanten für ...

1. ... den indizierten Wasserstoff
2. ... die als Suffix genannte charakteristische Gruppe
3. ... durch „-en“ oder „-in“ benannte Mehrfachbindungen
4. ... die Doppelbindung
5. ... als Präfix genannte Substituenten
6. ... den alphabetisch erstgenannten Substituenten



2H-Pyran-6-carbonitril

Welche Regeln gelten für die Beispiele?



8. Ergänzungen zur Nomenklatur von komplexen Verbindungen

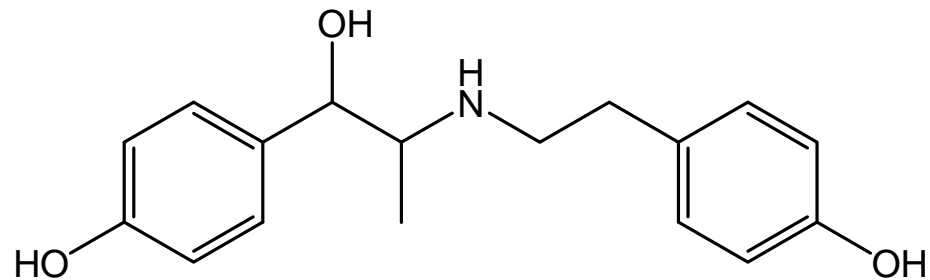
Reihenfolge der namensgebenden Komponenten

additive Endungen, z.B. -oxid
Suffix der hochrangigsten charakteristischen Gruppe
-en/-in
Stammsystem
Cyclo-/Bicyclo-/Spiro/Homo-/etc.
a-Terme
Indizierter Wasserstoff
Hydro- / Dehydro-
Substituenten

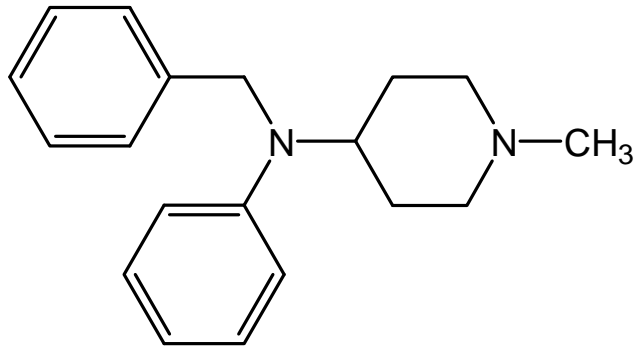
Übungen

1-[(2-Methoxy-6-methyl-3-pyridyl)methyl]-aziridin-2-carbonitril (INN: Ciamexon)

5-[3-(*tert*-Butylamino)-2-hydroxypropoxy]-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-2,3-diol (INN: Nadolol)



Übungen



4,4'-[(1*H*-1,2,4-Triazol-1-yl)methylen]-dibenzonitril
(INN: Letrozol)