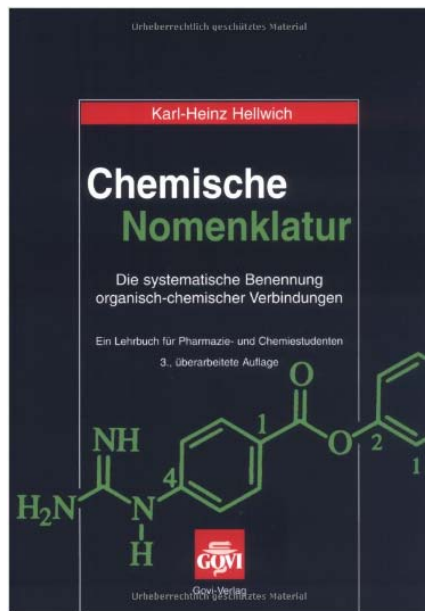


Seminar zur Chemischen Nomenklatur

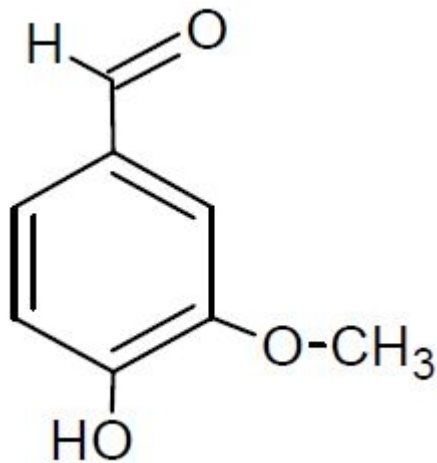
Literatur

- Karl-Heinz Hellwich: „Chemische Nomenklatur“ (3.te Auflage)



- Herbert Bartsch: „Die systematische Nomenklatur organischer Arzneistoffe“ (1.te Auflage)

Triviale, halbtriviale und systematische Bezeichnungen



Vanillin

oder

4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyd

Triviale, halbtriviale und systematische Bezeichnungen

- Trivialnamen
- Halbtrivialnamen

- Beilstein
- Chemical Abstracts

- IUPAC
International
Union
Pure
Appplied
Chemistry

Bezeichnung von Arzneimittel und Arzneistoff

Markenname

- Aspirin[®]

[®] ist ein registriertes
freierfundenes
Warenzeichen und ist
international geschützt

Internationaler Freiname (INNs)

- Acetylsalicylsäure
(ASS)

INNs sind internationale
Freinamen der WHO
Der Name hat keinen
Eigentümer

Themengebiete

1. Kettenförmige Kohlenwasserstoffe
2. Zyklische Kohlenwasserstoffe
3. Heterozyklen
4. Substitutive Nomenklatur
5. Additive Nomenklatur
6. Subtraktive Nomenklatur
7. Radikofunktionelle Nomenklatur
8. Konjunktive Nomenklatur
9. Ergänzungen zur Nomenklatur von komplexen Verbindungen

1. Kettenförmige Kohlenwasserstoffe

1.1 Unverzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Alkane

besitzen nur Einfachbindungen (gesättigt)

allgemeine Formel: C_nH_{2n+2}

Endung *-an* ab $n = 5$

Trivialnamen für $n = 1-4$

Methan	CH_4
Ethan	C_2H_6
Propan	C_3H_8
Butan	C_4H_{10}

1.1 Unverzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Zahlensilben

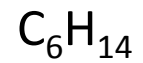
• 1	hen-	• 10	deca-	
• 2	do-	• 20	(i)cosa-	
• 3	tri-	• 30	tria	} conta-
• 4	tetra-	• 40	tetra	
• 5	penta-	• 50	penta	
• 6	hexa-	• 60	hexa	
• 7	hepta-	• 70	hepta	
• 8	octa-	• 80	octa	
• 9	nona-	• 90	nona	
		• 100	hecta	

Ausnahme: C₁₁: Undecan

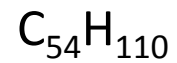
Beilstein: eicosa- statt icos-

1.1 Unverzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Beispiele



Docosan



Trihexacontahectan

1.1 Unverzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Alkene / Olefine

Verfügen über eine (Alkene) oder mehrere (Olefine) C-C-Doppelbindung (C=C)

allgemeine Formel von Alkenen:



Endung *-en* ab n = 5

Trivialnamen für n = 2-4

Ethen	C_2H_4
Propen	C_3H_6
Buten	C_4H_8

und Propadien = Allen C_3H_4

Alkine

Verfügen über eine C-C-Dreifachbindung (C≡C)

allgemeine Formel: C_nH_{2n-2}

Endung *-in* ab n = 5

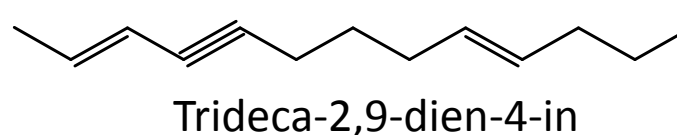
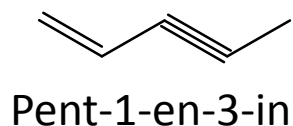
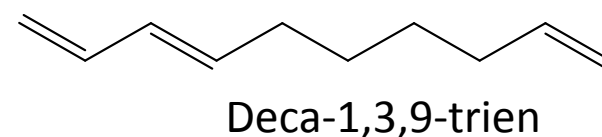
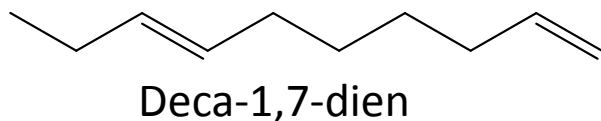
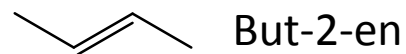
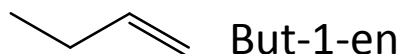
Trivialnamen für n = 2-4

Ethin	C_2H_2
Propin (= Acetylen)	C_3H_4
Butin	C_4H_6

1.1 Unverzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Lokanten

Ab Buten bzw. Butin muss die Lage der Doppelbindung durch Lokanten angegeben werden



↑
„-en“ vor „-in“

Regeln zur Nummerierung der Kette

Alkene oder Alkine: Wert des ersten Lokanten soll minimal sein.

Alkene + Alkine: Die Summe der Lokanten soll minimal sein

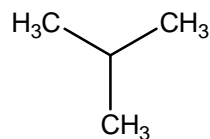
1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Halb-Trivialnamen

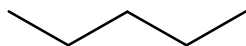
n-Butan (= Butan)



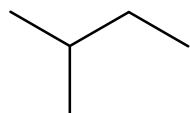
Isobutan



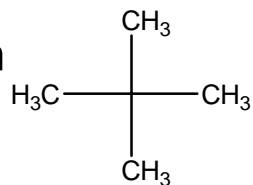
n-Pentan



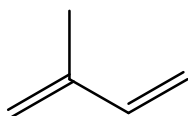
Isopentan



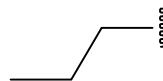
Neopentan



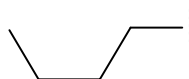
Isopren



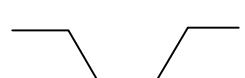
Propyl-



Butyl-

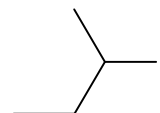


Pentyl-

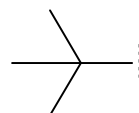


usw.

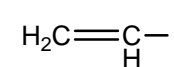
sec-Butyl



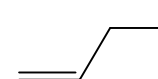
tert-Butyl



Vinyl-

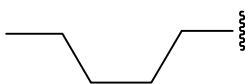


Allyl-

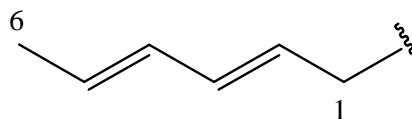


1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Systematische Nomenklatur von substituierten Kohlenstoffketten



Pentan-1-yl (= Pentyl)



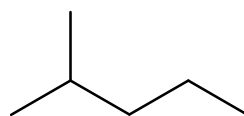
Hexa-2,4-dien-1-yl

Die freie Valenz hat Priorität gegenüber Mehrfachbindungen, d.h. ein möglichst niedriger Lokant wird für die freie Valenz angestrebt.

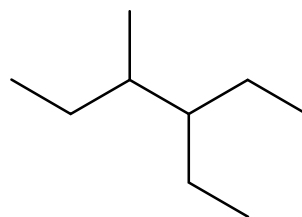
1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Regeln zur Nomenklatur

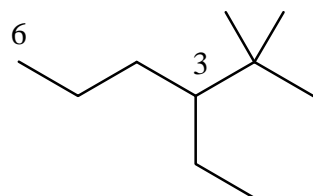
1. Der Name und Lokant des Substituenten wird der Hauptkette vorangestellt.
2. Bei mehreren Substituenten werden diese alphabetisch geordnet.
3. Multiplikative Präfixe (di-, tri-, etc. bzw. bis-, tris-, etc.) und die Vorsilben *sec-* und *tert-* bleiben unberücksichtigt.
4. Sind die Substituenten selbst substituiert, wird deren Name durch Klammern eingeschlossen.



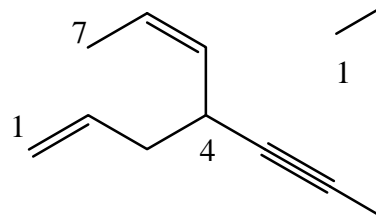
2-Methylpentan



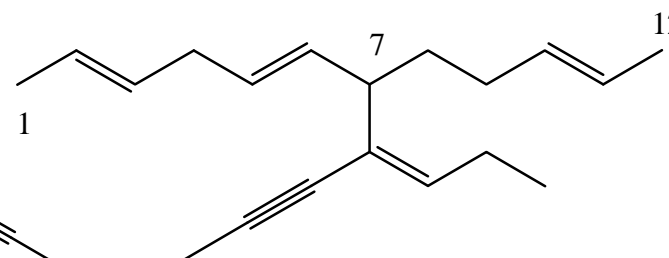
3-Ethyl-4-methylhexan



3-Ethyl-2,2-dimethylhexan



4-(Prop-1-en-1-yl)hepta-1,5-dien

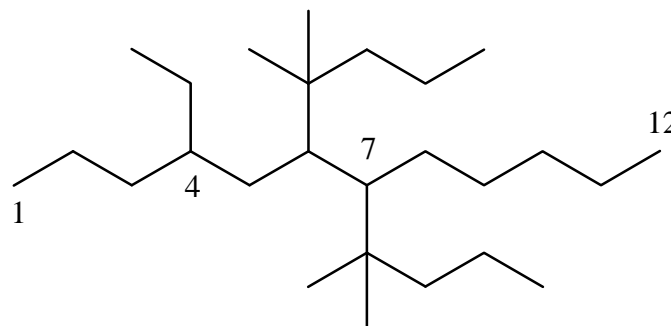


7-[1-(Prop-1-en-1-yl)but-1-en-1-yl]dodeca-2,5,10-trien

1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

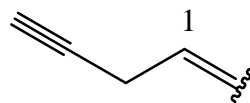
Regeln zur Nomenklatur

5. Mehrfach vorkommende substituierte Substituenten werden durch die multiplikativen Präfixe bis-, tris-, tetrakis-, pentakis-, etc. angezeigt



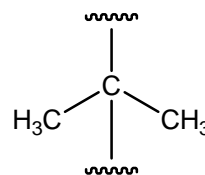
6,7-Bis(1,1-dimethylbutyl)-4-ethyldodecan

6. Doppelvalente Substituenten bekommen die Endung -yliden.

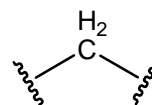


But-3-en-1-yliden

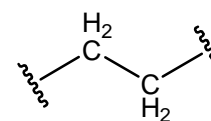
7. Verbrückende Substituenten werden über multiplikative Präfixe und ihre Lokanten angegeben.



Propan-2,2-diyl-



Methylen



Ethylen

Trivialnamen: Methylen, Ethylen

1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

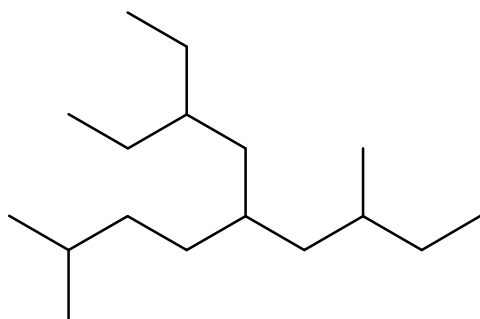
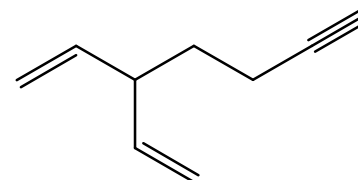
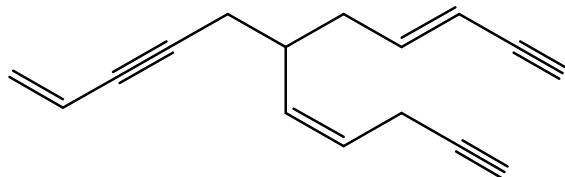
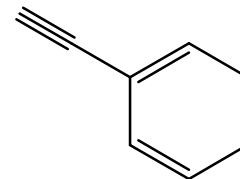
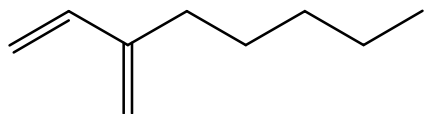
Regeln zur Festlegung und Nummerierung der Hauptkette

Hauptkette ist die Kette, die

1. ... die meisten Mehrfachbindungen enthält
2. ... die längste Kette ist
3. ... die meisten Doppelbindungen enthält
4. ... den niedrigsten Lokantensatz für die Mehrfachbindungen erhält
5. ... den niedrigsten Lokantensatz für die Doppelbindungen erhält
6. ... die meisten Substituenten besitzt
7. ... den niedrigsten Lokantensatz für die Substituenten erhält
8. ... den alphabetisch erstgenannten Substituenten trägt
9. ... den niedrigsten Lokanten für den alphabetisch erstgenannten Substituenten erhält





























































1.2 Verzweigte azyklische Kohlenwasserstoffe

Beispiele

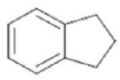
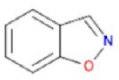
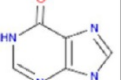
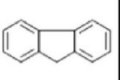
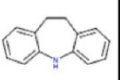
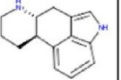
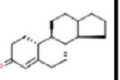
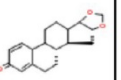

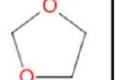

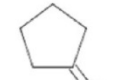
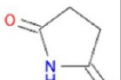
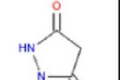

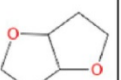
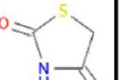
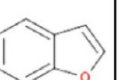
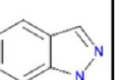
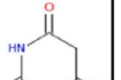
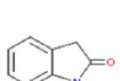
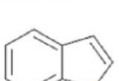
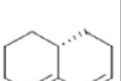
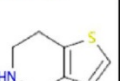
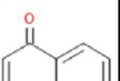
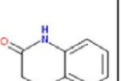
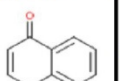
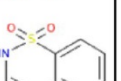
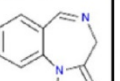
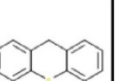
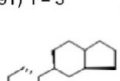
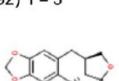
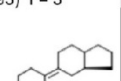
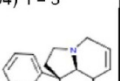
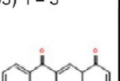
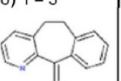
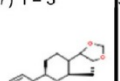
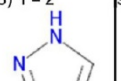




2. Zyklische Kohlenwasserstoffe

Table 1. Top 100 Most Frequently Used Ring Systems from Small Molecule Drugs Listed in the FDA Orange Book Sorted by Descending Frequency (f) and Then Ascending Molecular Weight

1) f = 538 	2) f = 54 	3) f = 54 	4) f = 51 	5) f = 38 	6) f = 32 	7) f = 30 	8) f = 29 	9) f = 29 	10) f = 28 
11) f = 27 	12) f = 25 	13) f = 24 	14) f = 20 	15) f = 19 	16) f = 19 	17) f = 17 	18) f = 17 	19) f = 16 	20) f = 15 
21) f = 14 	22) f = 14 	23) f = 12 	24) f = 12 	25) f = 11 	26) f = 11 	27) f = 11 	28) f = 10 	29) f = 9 	30) f = 9 
31) f = 9 	32) f = 9 	33) f = 8 	34) f = 8 	35) f = 8 	36) f = 8 	37) f = 8 	38) f = 7 	39) f = 7 	40) f = 7 
41) f = 7 	42) f = 7 	43) f = 7 	44) f = 6 	45) f = 6 	46) f = 5 	47) f = 5 	48) f = 5 	49) f = 5 	50) f = 5 
51) f = 5 	52) f = 5 	53) f = 5 	54) f = 5 	55) f = 4 	56) f = 4 	57) f = 4 	58) f = 4 	59) f = 4 	60) f = 4 

2. Zyklische Kohlenwasserstoffe

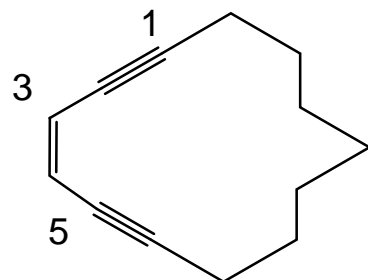
61) $f = 4$ 	62) $f = 4$ 	63) $f = 4$ 	64) $f = 4$ 	65) $f = 4$ 	66) $f = 4$ 	67) $f = 4$ 	68) $f = 4$ 	69) $f = 3$ 	70) $f = 3$ 
71) $f = 3$ 	72) $f = 3$ 	73) $f = 3$ 	74) $f = 3$ 	75) $f = 3$ 	76) $f = 3$ 	77) $f = 3$ 	78) $f = 3$ 	79) $f = 3$ 	80) $f = 3$ 
81) $f = 3$ 	82) $f = 3$ 	83) $f = 3$ 	84) $f = 3$ 	85) $f = 3$ 	86) $f = 3$ 	87) $f = 3$ 	88) $f = 3$ 	89) $f = 3$ 	90) $f = 3$ 
91) $f = 3$ 	92) $f = 3$ 	93) $f = 3$ 	94) $f = 3$ 	95) $f = 3$ 	96) $f = 3$ 	97) $f = 3$ 	98) $f = 2$ 	99) $f = 2$ 	100) $f = 2$ 

2. Zyklische Kohlenwasserstoffe

2.1 Einfache zyklische Kohlenwasserstoffe

Die Nomenklatur folgt den gleichen Regeln wie bei den azyklischen Kohlenwasserstoffen.

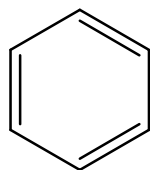
Zur Kennzeichnung des Ringes wird dem Namen die Vorsilbe *Cyclo-* vorangestellt



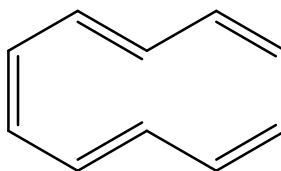
Cyclotridec-3-en-1,5-diin

Minimaler Lokantensatz für
Mehrfachbindungen!

Besonderheiten



Benzen



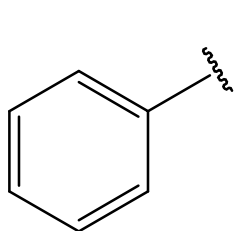
[10]Annulen

↑ Anzahl C-Atome

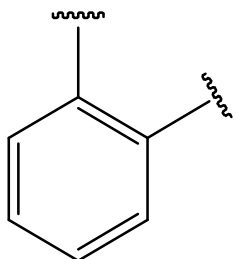
↓ vollständig konjugiert!

2.1 Einfache zyklische Kohlenwasserstoffe

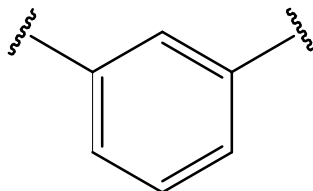
Besonderheiten



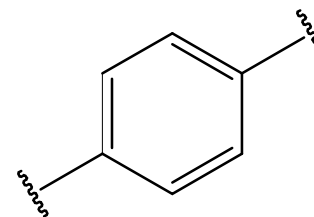
Phenyl



1,2-Phenylene
= *o*-Phenylene



1,3-Phenylene
= *m*-Phenylene

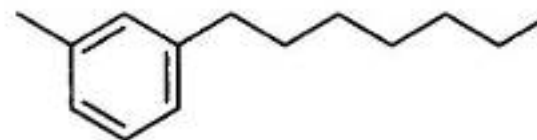


1,4-Phenylene
= *p*-Phenylene

Die freie Valenz von ringförmigen Substituenten trägt immer den Lokanten 1!

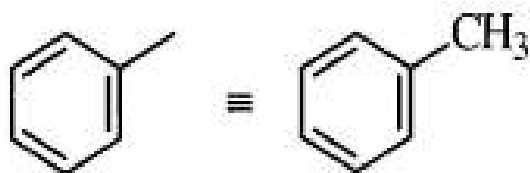
Kohlenstoffzyklen mit Seitenketten

Stammsystem kann entweder das größere oder das höher substituierte sein.

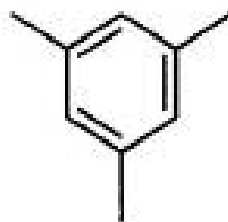


2.1 Einfache zyklische Kohlenwasserstoffe

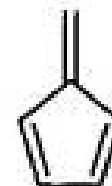
Trivialnamen von verzweigten zyklischen Kohlenwasserstoffen



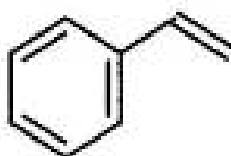
Toluen oder Toluol



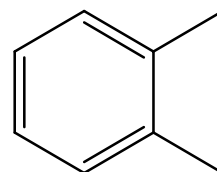
Mesitylen



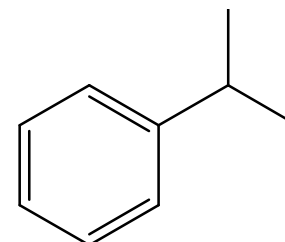
Fulven



Styren oder Styrol



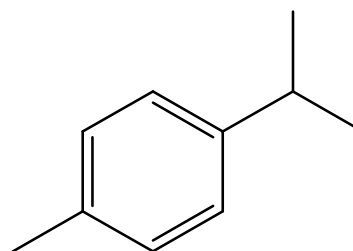
o-Xylen oder *o*-Xylol



Cumen oder Cumol



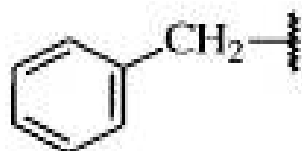
Stilben



p-Cymen oder *p*-Cymol

2.1 Einfache zyklische Kohlenwasserstoffe

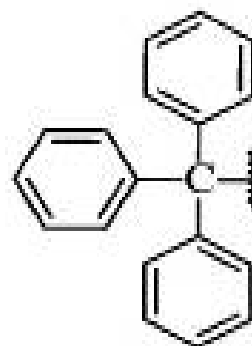
Trivialnamen von verzweigten zyklischen Kohlenwasserstoffen



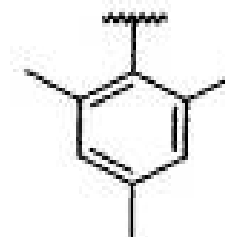
Benzyl



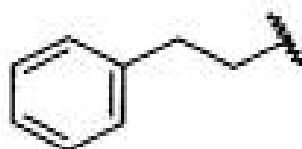
Benzyliden
(früher Benzal)



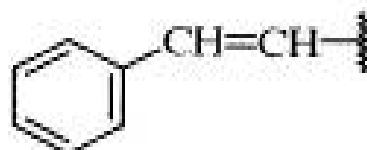
Trityl



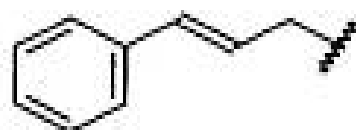
Mesityl



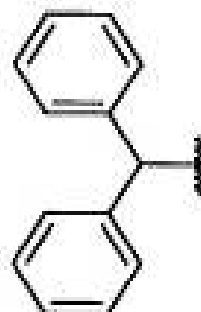
Phenethyl



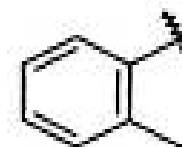
Styryl



Cinnamyl

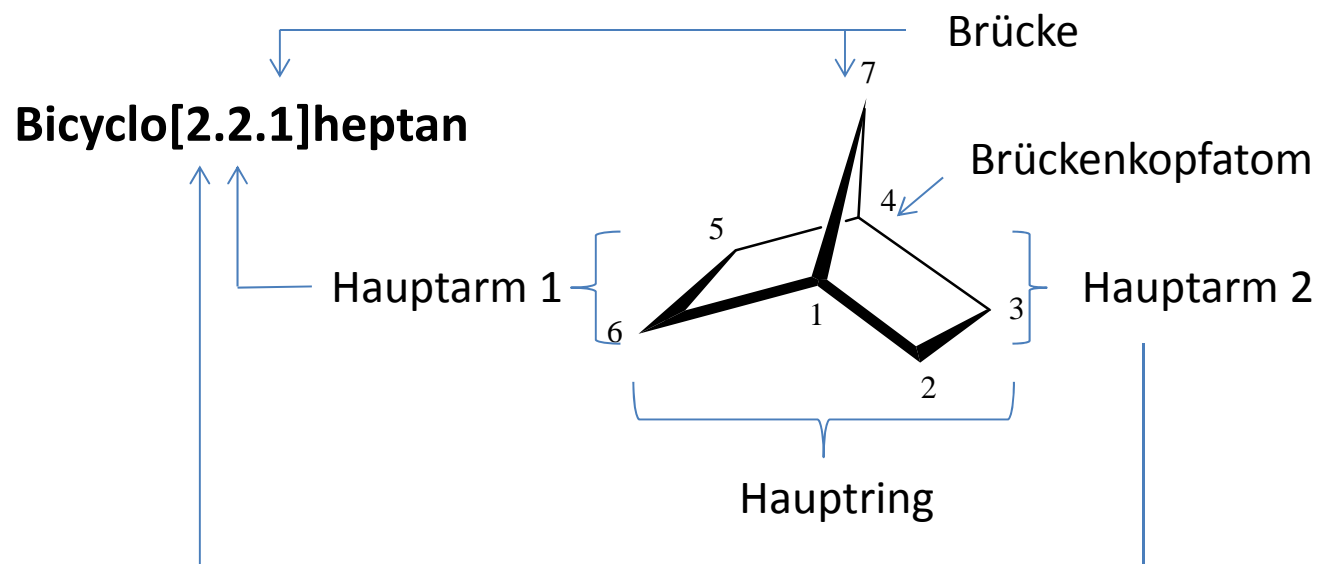


Benzhydryl



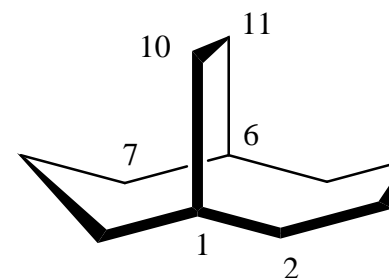
o-Tolyl
(auch *m*- und *p*-Isomere)

2.2 Verbrückte zyklische Kohlenwasserstoffe



Regeln zur Nummerierung

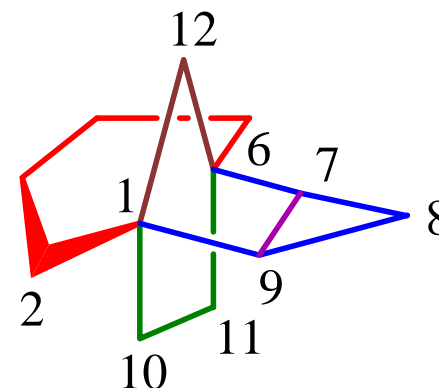
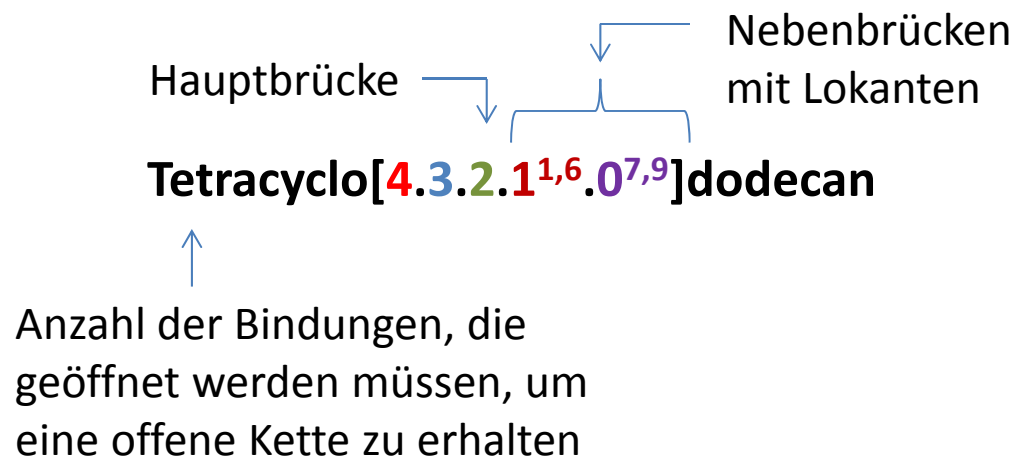
- Beginnend an einem Brückenkopfatom,
- weiter durch den längeren Teil des Hauptringes,
- über den kürzeren Teil des Hauptrings
- und die Gerüst-atome der Brücke aus Richtung von C1



Bicyclo[4.3.2]undecan

2.2 Verbrückte zyklische Kohlenwasserstoffe

Polyzyklische Kohlenwasserstoffe



Die Hauptbrücke ist die ...

- 1) ... längste Brücke.
- 2) ... die, die den Hauptring symmetrisch teilt.
- 3) ... den kleinsten Satz an hochgestellten Lokanten hat.

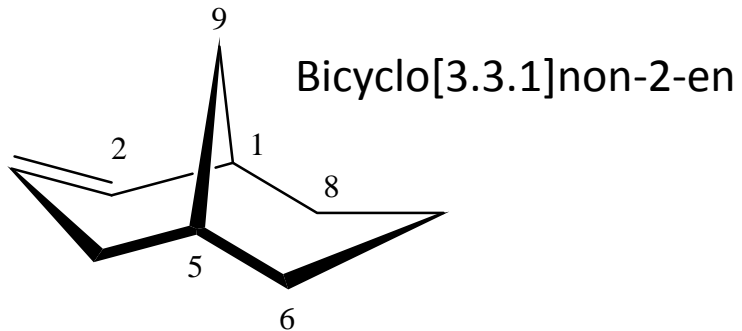
Die Nebenbrücken werden ...

- 1) ... nach abnehmender Länge
- 2) ... und zunehmendem Lokantensatz geordnet.

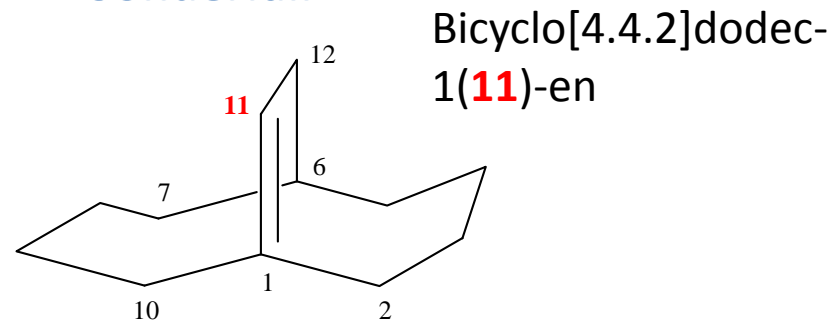
2.2 Verbrückte zyklische Kohlenwasserstoffe

Sonderfall bei ungesättigten Polyzyklen

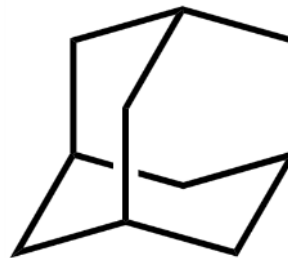
normal



Sonderfall



Wichtiger Trivialname

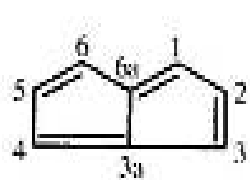


Adamantan
(Tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]decan)

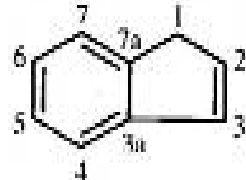
2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

Anellierte Systeme haben die maximale Anzahl an nicht kumulierten Doppelbindungen.

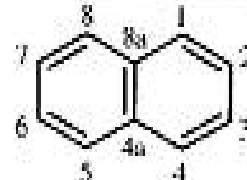
Wichtige Trivialnamen



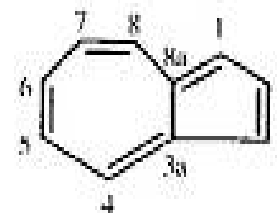
3 Pentalen



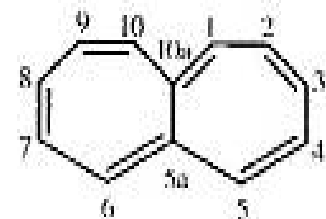
4 Inden
(1*H*-Inden)^a



5 Naphthalen^b
oder
Naphthalin

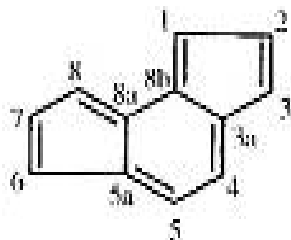


6 Azulen

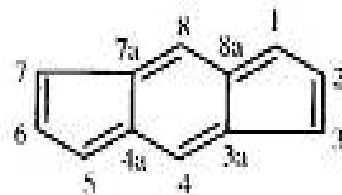


7 Heptalen^c

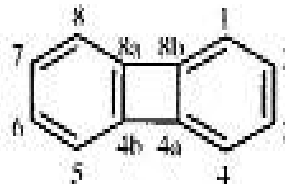
„-alen“: Bizyklisch aus zwei identischen Ringen



8 *as*-Indacen
(*as* steht für
»asymmetrisch«)



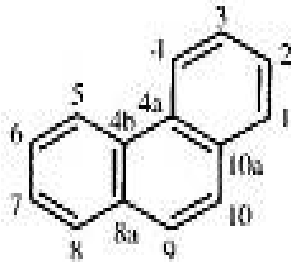
9 *s*-Indacen (*s* steht
für »symmetrisch«)



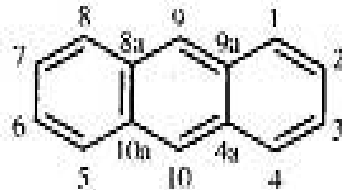
10 Biphenylen^d

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

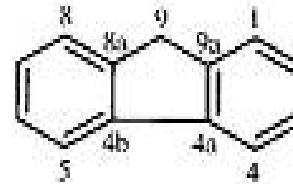
Trivialnamen



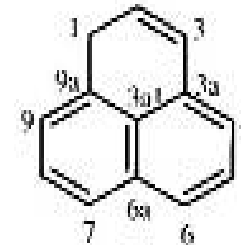
4 Phenanthren^b
(Ausnahme von
der systematischen
Bezifferung)



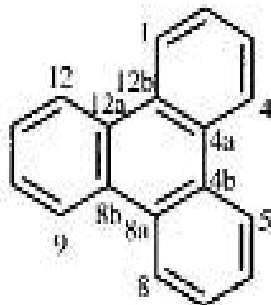
15 Anthracen^b
(Ausnahme von
der systematischen
Bezifferung)



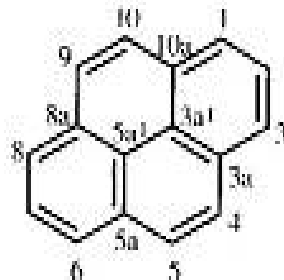
12 Fluoren
(9*H*-Fluoren)^a



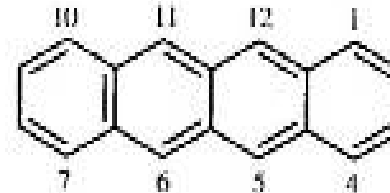
13 Phenalen
(1*H*-Phenalen)^a



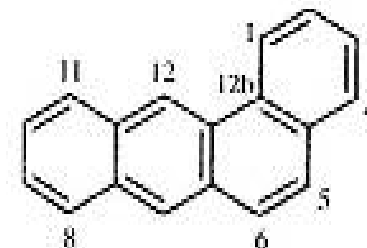
19 Triphenylen^c



20 Pyren



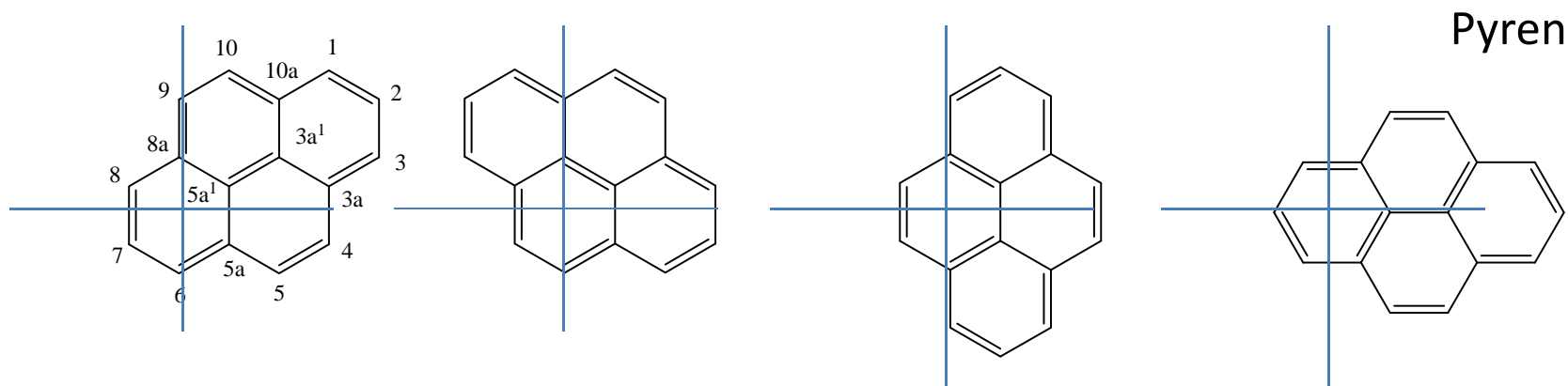
23 Tetracen^c
(früher Naphthacen)



22 Tetraphen
(bisher Benzo[*a*]anthracen)

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

Nummerierung von anellierten Kohlenwasserstoffen



1) Orientierung der Ringe

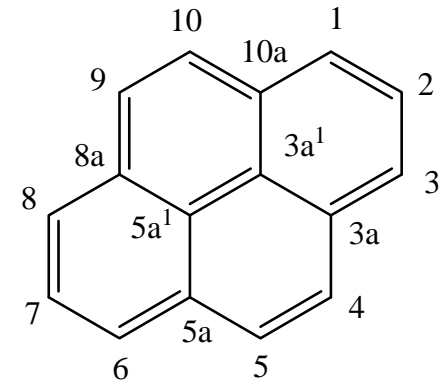
- Maximale Anzahl an Ringen auf der x-Achse und im 1.ten Quadranten
- Minimale Anzahl an Ringen im 3.ten Quadranten
- Möglichst niedriger Lokantensatz für die Anellierungspositionen

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

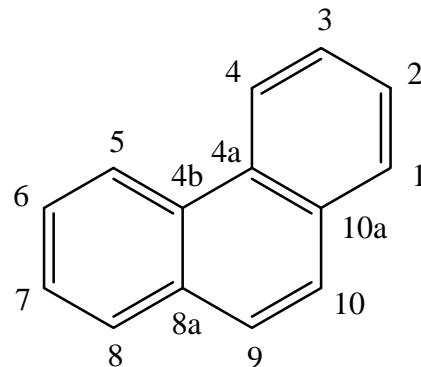
Nummerierung von anellierten Kohlenwasserstoffen

2) Nummerierung

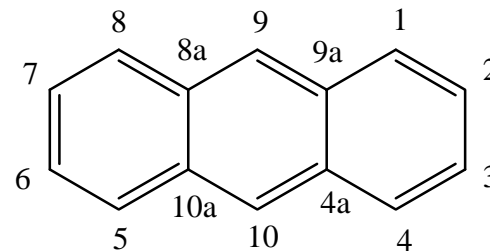
- Start am obersten und rechtesten Ring
- Im Uhrzeigersinn entlang der Peripherie
- Anellierungsstellen bekommen keine eigene Zahl
- Innere Atome werden nach dem nächsten Atom mit dem geringsten Lokanten benannt. Die Zahl der Bindungen zwischen diesen Atomen ist hochgestellt.



Ausnahmen



Phenanthren



Anthracen

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

Grundregeln zur systematische Nomenklatur

Zerlegung des System wird in Basiskomponente und Anelland.

Basiskomponente ist das Ringsystem, das....

1. ... möglichst viele Teilringe besitzt
2. ... den größten Ring in der ersten Vergleichsposition besitzt
3. ... die bevorzugte Orientierung aufweist
4. ... möglichst viele Anellanden gebunden hat

Monozyklische Basiskomponenten werden als „[n]Annulen“ bezeichnet.

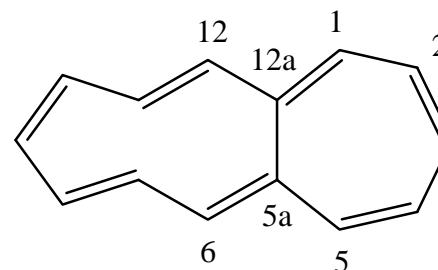
Der Name des **Anellanden** erhält die Endung „o“.

- Ausnahmen:
- 1) Benzo, Naptho, Anthra, Phenanthro
 - 2) Monozyklische Anellanden werden als Cyclopropa, Cyclopenta, Cyclohepta bezeichnet

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

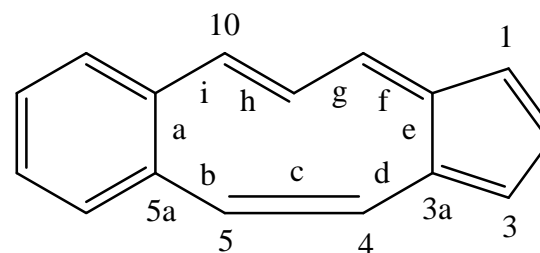
Systematische Nomenklatur

- Basiskomponente und Anelland haben beide nur gleichwertige Seiten



Cyclohepta[9]annulen

- Nur Anelland hat gleichwertige Seiten



Benzo[a]cyclopenta[e][9]annulen

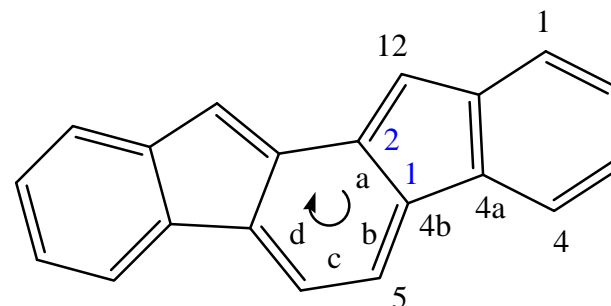
Alphabetische Ordnung

Die Benennung der Seiten folgt den Regeln zur Nummerierung der Basiskomponente. Angestrebt wird ein minimaler Satz an Buchstabenlokanten.

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

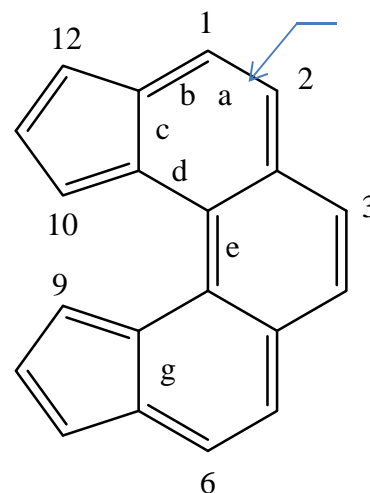
Systematische Nomenklatur

- Basiskomponente und Anelland haben beide nicht nur gleichwertige Seiten



Indeno[2,1-a]fluoren

- Mehrere gleiche Anellanden



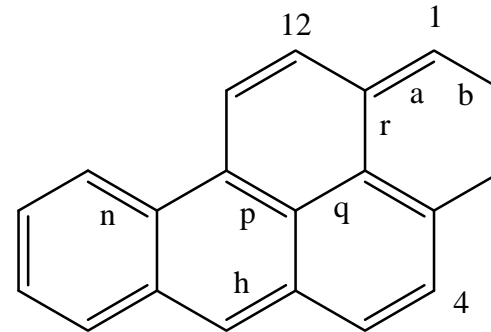
Abweichung von
der system. Num-
merierung!

Dicyclopenta[c,g]phenanthren

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

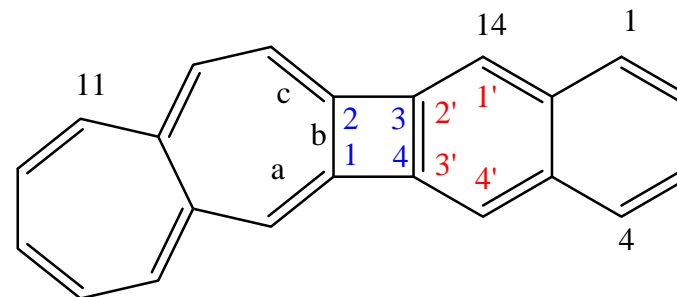
Systematische Nomenklatur

- Der Anelland ist über mehrere Seiten anelliert



Benzo[*pqr*]tetraphen

- Der Anelland ist selbst anelliert

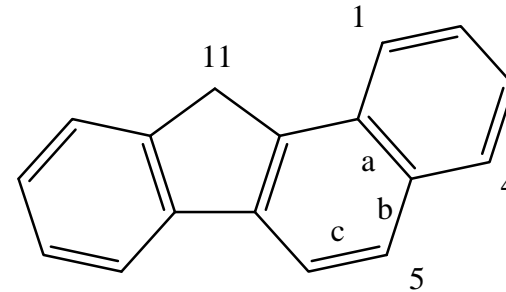


Naphto[*2',3':3,4*]cyclobuta[*1,2-b*]heptalen

2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

Systematische Nomenklatur

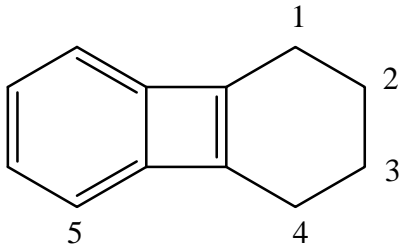
- Das anellierte System enthält eine gesättigte Position



11H-Benzo[a]fluoren

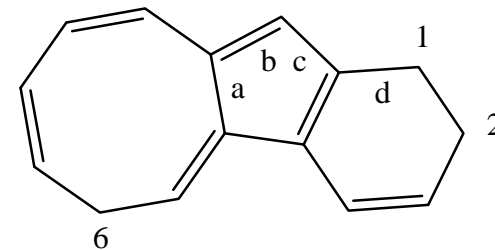
indizierter Wasserstoff \uparrow

- Das anellierte System enthält mehrere gesättigte Positionen



1,2,3,4-**Tetrahydro**biphenylen

\uparrow
muss geradzahlig sein!



2,6-Dihydro-**1H**-cycloocta[a]inden

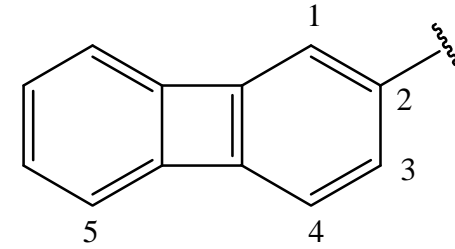
\uparrow
sonst zusätzlich!



2.3 Anellierte Kohlenwasserstoffe

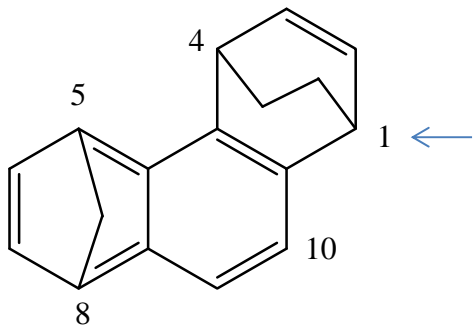
Systematische Nomenklatur

- Anellierte Systeme als Substituenten
Trivialnamen: Anthryl, Phenanthryl und Naphthyl (z.B. 2-Naphthyl-)



Biphenylen-2-yl

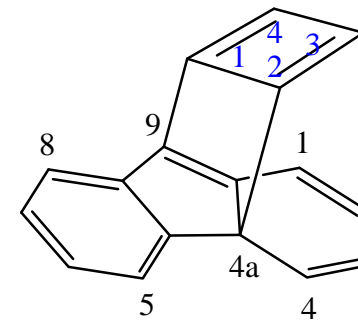
- Das anellierte System ist überbrückt



Abweichung von
der system. Num-
merierung!

1,4-Dihydro-1,4-ethano-5,8-methanophenanthren

„o“ bei Ketten und bei Benzeno



4a,9-[1,2]Epicyclobutafluoren

„Epi“ bei Ringen