

NOMENKLATURREGELN

Dieses Handout soll das Erlernen der Nomenklatur von organischen Substanzen erleichtern. Die Regeln werden aber nur verkürzt dargestellt, auf weiterführende Lehrbücher wird verwiesen:

D. Hellwinkel, *Die systematische Nomenklatur der organischen Chemie – Eine Gebrauchsanweisung*, 5. Auflage, Springer 2006.

K.H. Hellwich, *Chemische Nomenklatur. Die systematische Benennung organischer Verbindungen*, Govi-Verlag, 3. Auflage 2008.

I. Nomenklatur verzweigter Alkane

1. Suchen Sie die längste Kohlenstoffkette (Stammkohlenwasserstoff) und benennen Sie sie:

- 1.1 Die längste Kette ist die Hauptkette.
- 1.2 Bei gleicher Länge entscheidet die höchste Anzahl der Seitenketten.
- 1.3 Bei gleicher Anzahl der Seitenketten entscheidet die Kette, deren Seitenketten die niedrigsten Positionsnummern haben.
- 1.4 Bei gleichen Positionsnummern entscheidet die Kette, deren Seitenketten selbst am wenigsten verzweigt sind.

[Achtung bei Molekülen mit funktionellen Gruppen, inkl. Cycloalkanen, Alkenen und Alkinen, wird der Stammname so gewählt, dass er die längste Kohlenstoffkette angibt, die die Funktionalität mit der höchsten Priorität enthält (siehe Seite 3 und 4)].

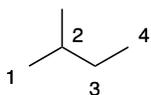
2. Bestimmen Sie die Namen der an die längste Kette gebundenen Alkylgruppen.

3. Nummerieren Sie die Kohlenstoffatome der längsten Kette von dem Ende, das dem Substituenten am nächsten ist (die Summe der Positionsnummern muss möglichst klein sein).

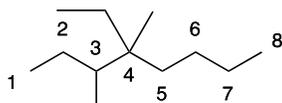
4. Aufbau des Namens: (1. Nummer des Kohlenstoffs, an den der Substituent gebunden ist) (2. Bindestrich) (3. Häufigkeit (Zahlenwort) dieses Substituenten im Molekül) (4. Name der Seitenkette; bei mehreren Substituenten in alphabetischer Reihenfolge unter Vernachlässigung der Zahlenwörter) (5. Name des Stammalkans).

Zusatzinformationen: Zahlwörter: Mono (1), Di (2), Tri (3), Tetra (4), Penta (5), Hexa (6), Hepta (7), Octa (8).

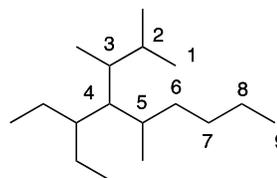
Beispiele:



2-Methylbutan



4-Ethyl-3,4-dimethyloctan



4-(1-Ethylpropyl)-2,3,5-trimethylnonan

Stammnamen gesättigter Kohlenwasserstoffe (C_nH_{2n+2}) (die ersten vier Namen sind **Trivialnamen**, danach geht es systematisch weiter: **„Griechisches/lateinisches Zahlwort oder entsprechendes Fragment, gefolgt von Endung „an“**):

Methan (CH_4), Ethan (C_2H_6), Propan (C_3H_8), Butan (C_4H_{10}), Pentan (C_5), Hexan (C_6), Heptan (C_7), Octan (C_8), Nonan (C_9), Decan (C_{10}), Undecan (C_{11}), Dodecan (C_{12}), ... Die Namen längerer Kohlenwasserstoffe ergeben sich aus den Fragmenten der folgenden Tabelle (außer *zwei Ausnahmen*: Icosan (C_{20}), Henicosan (C_{21})): Docosan (C_{22}), Tricosan (C_{23}), ... Triacontan (C_{30}), Hentriacontan (C_{31}), Dotriacontan (C_{32}), Tritriacontan (C_{33}), ... Octanonacontan (C_{98}), ...

Vorsilbe für Einer	Silbe für Zehner	Endung (Suffix)
1 Hen-	10 -decan	-
2 Do-	20 -cosan	-
3 Tri-	30 -tria-	-contan
4 Tetra-	40 -tetra-	-contan
5 Penta-	50 -penta-	-contan
6 Hexa-	60 -hexa-	-contan
7 Hepta-	70 -hepta-	-contan
8 Octa-	80 -octa-	-contan
9 Nona-	90 -nona-	-contan

Wichtig: „Hexan“ bedeutet C_6H_{14} . In „2-Methylhexan“ bedeutet der Stammname „hexan“ allerdings nur, dass die längste Kohlenstoffkette 6 Kohlenstoffatome lang ist.

Endung „yl“: Der Name der Substituenten wird aus dem Stammnamen durch **Austauschen der Endung „an“ gegen „yl“** gebildet.

Also lauten die Substituenten (jeweils C_nH_{2n+1}): Methyl (CH_3), Ethyl (C_2H_5), Propyl (C_3H_7), Butyl (C_4H_9), Pentyl, Hexyl, Heptyl, Octyl, Nonyl, Decyl, Undecyl, ...

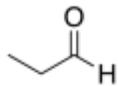
„Hexyl“ bedeutet z. B., dass eine C_6H_{13} -Kette als Substituent vorliegt.

Die Endung „ylen“ steht für den Verlust von zwei Wasserstoffen im Vergleich zum Stammalkan (jeweils C_nH_{2n}): Methylen (CH_2), Ethylen (C_2H_4), Propylen (C_3H_6), ...

II. Nomenklatur funktionalisierter Verbindungen

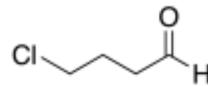
Dabei gelten grundsätzlich die oben angegebenen Regeln. Allerdings ist der Stammname nicht mehr zwangsläufig von der längsten Kohlenstoffkette abgeleitet. Vielmehr wird der Stammname so gewählt, dass er die längste Kohlenstoffkette angibt, die die Funktionalität mit der höchsten Priorität enthält (siehe Prioritätstabelle auf der nächsten Seite). Die Endung des Namens (Suffix) wird von der Funktionalität bestimmt, die die höchste Priorität besitzt (siehe nächste Seite).

Beispiele:

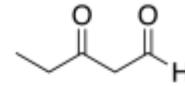


Propenal

(die Aldehydgruppe wird auch als CHO-Gruppe dargestellt, aber niemals als COH-Gruppe)

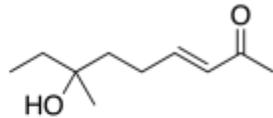


4-Chlorobutanal



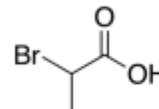
3-Oxopentanal

(die Aldehydgruppe besitzt eine höhere Priorität als die Ketogruppe)



7-Hydroxy-7-methylnon-3-en-2-on

(in diesem Namen fehlt noch die Beschreibung der Doppelbindungsgeometrie)

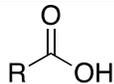
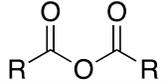
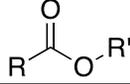
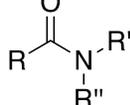
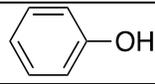
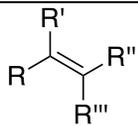


2-Brompropansäure

Einige Gruppen, die durch Präfix benannt werden:

Substituent	Name	Substituent	Name
-F	Fluor-	=N ₂	Diazo-
-Cl	Chlor-	-N ₃	Azido-
-Br	Brom-	-NO ₂	Nitro-
-I	Iod-	-NCO	Isocyanato-
-OR	(R-)oxy- z. B. „Methoxy“-	-NCS	Isothiocyanato-
-SR	(R-)sulfanyl-		

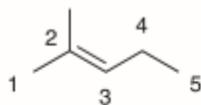
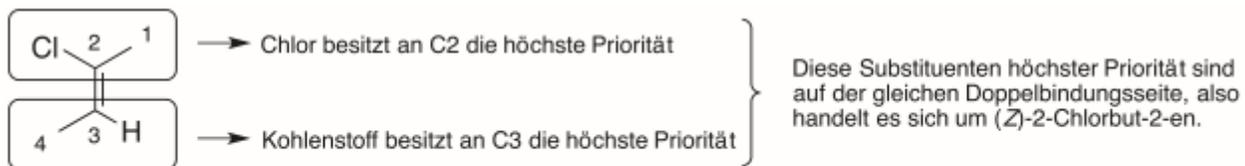
Prioritätsreihenfolge der funktionellen Gruppen nach IUPAC:

Verbindungs- klasse	Formel	Suffix	Verwendung des Suffix	Präfix
Hohe Priorität				
Carbonsäuren		-	-<Stamm>säure	(Carboxy-)
Carbonsäure- anhydride		-	-<Stamm>säureanhydrid	-
Carbonsäure- ester		-	-<Stamm>säure-<R'- Gruppe>ylester	Alkoxy-carbonyl Aryloxy-carbonyl
Carbonsäure- halogenide		-	-<Stamm>säure- <Halogenid>-	<Halogen>formyl
Carbonsäure- amide		-	-<Stamm>säure-N,N-<R'- Gruppe>yl<R''- Gruppe>ylamid	Carbamoyl-
Nitrile	$R-C\equiv N$	-	-<Stamm>säurenitril	Cyano-
Aldehyde		-al	-<Stamm>al	Formyl-
Ketone		-on	-<Stamm>on	Oxo-
Alkohole	$R-OH$	-ol	-<Stamm>ol	Hydroxy-
Phenole		-ol	-<Stamm>ol	Hydroxy-
Thiole	$R-SH$	-thiol	-<Stamm>thiol	Mercapto-
Amine	$R-NH_2$	-ylamin	-<Gruppe>ylamin	Amino-
Ether	$R-O-R'$	-	<R-Gruppe>yl<R'- Gruppe>ylether	<Gruppe>oxy-
Alkene		-en	-<Stamm>en	<Gruppe>enyl-
Alkine	$R-C\equiv C-R'$	-in	-<Stamm>in	<Gruppe>inyl
Halogen- verbindungen	$R-X$	-	-	<Halogen>-
Cycloalkane		-an, Präfix: cyclo	Cyclo-<Stamm>an	Cyclo<Gruppe> yl-
Alkane	$R-H$	-an	-<Stamm>an	<Gruppe>yl-
Niedrige Priorität				

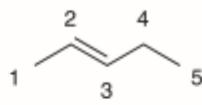
Dabei steht R für Alkyl und X für Halogen (F, Cl, Br, I)

III. Nomenklatur von Alkenen und Alkinen

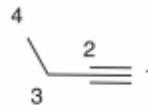
Die Position der Doppel- oder Dreifachbindung muss eindeutig festgelegt werden und zwar durch den Kohlenstoff, an dem die Doppel- oder Dreifachbindung beginnt. Zudem muss bei Doppelbindungen die Geometrie der Doppelbindung angegeben werden (cis-trans/(*E*)-(Z)). Für die *E/Z*-Nomenklatur wird zunächst an jedem der beiden Doppelbindungsenden der Substituent mit der höchsten Priorität bestimmt. Die Inspektion der Substituenten auf jeder Doppelbindungshälfte erfolgt nach dem CIP-System (Cahn-Ingold-Prelog) und ergibt die Prioritäten (Ordnungszahlen). *E* oder *Z* beschreibt dann die Lage dieser beiden Substituenten: *E* heißt, dass diese auf verschiedenen Seiten der Doppelbindung sind (entgegen), *Z* bedeutet, dass sie auf der gleichen Seite sind (zusammen). Die Lage und Doppelbindungskonfiguration werden vor dem systematischen Namen in Klammern gesetzt.



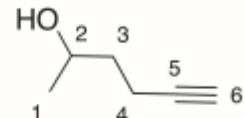
2-Methylpent-2-en



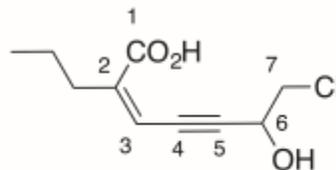
(*E*)-Pent-2-en oder trans-Penten



But-1-in



Hex-5-in-2-ol



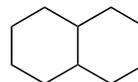
(*Z*)-7-Chlor-6-hydroxy-2-propylhepta-2-en-4-insäure

IV. Nomenklatur von polycyclischen Verbindungen

Bei polycyclischen Verbindungen wird die Anzahl (griech. Zahlwort) der Cyclen (z. B. „Bicyclo-“, oder „Tricyclo-“) vor die Anzahl der Brücken (in eckigen Klammern) gesetzt (z. B. „Bicyclo[2.1.0]“), bevor dann der Stammmname mit der funktionellen Gruppe folgt. Die Anzahl der Brückenglieder wird absteigend geordnet.



Bicyclo[2.2.1]heptan



Bicyclo[4.4.0]decan

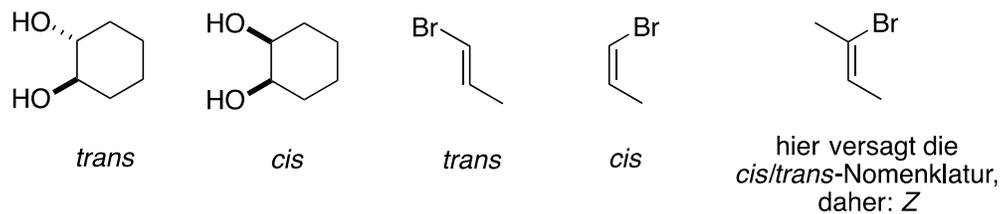
V. Einige stereochemische Begriffe

Epimere: Diastereomere, die sich nur in der Konfiguration an einem Chiralitätszentrum unterscheiden.

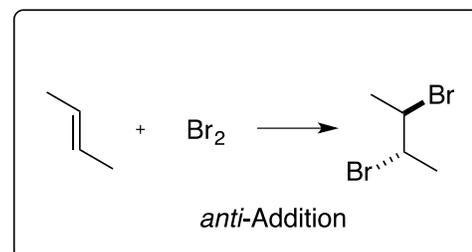
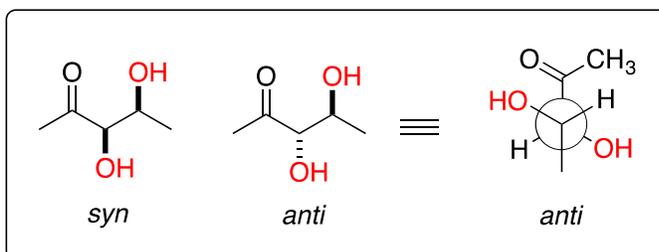
Anomere: Besondere Form von Epimeren. Sie unterscheiden sich in ihrer Konfiguration am anomeren Kohlenstoff (z. B. Zuckerhalbacetalform). Anomere existieren häufig in einem dynamischen Gleichgewicht.

E-/*Z*-Nomenklatur zur Beschreibung von Doppelbindungsgeometrien (*E* = Entgegen, *Z* = Zusammen): Prioritäten nach CIP. Verwendung auch für Bindungsordnungen zwischen 1 und 2, sowie für C=Heteroatom oder Heteroatom=Heteroatom-Bindungen zugelassen. Nicht zulässig für relative Stereochemie an Cyclen (siehe hierfür *cis* und *trans*).

cis (diesseitig) und *trans* (jenseitig): Wird zur Beschreibung der Geometrie 1,2-disubstituierter Doppelbindungen und bei zweifach substituierten Ringsystemen verwendet, um die relative Anordnung dieser Substituenten zueinander zu beschreiben.



Eine ähnliche Bedeutung wie *cis* und *trans* besitzen *syn* (auf der gleichen Seite einer Referenzebene) und *anti* (auf verschiedenen Seiten), allerdings sind diese Begriffe nicht synonym. *Syn* und *anti* werden zum einen verwendet, um die Art der Addition oder Eliminierung zu beschreiben (z.B. addierte Gruppen auf der gleichen Seite (*syn*-Addition) oder auf verschiedenen Seiten (*anti*-Addition)). Weiterhin dienen *syn* und *anti* auch der Beschreibung der relativen Konfiguration offenkettiger Moleküle. Dabei wird das Kohlenstoffgerüst als horizontale Zick-Zack-Kette dargestellt. Befinden sich die Substituenten, deren relative Anordnung zueinander beschrieben werden soll, auf der gleichen Seite, handelt es sich um *syn*, ansonsten um *anti*. Geeignet sind auch die von den Zuckern abgeleiteten Begriffe *threo* (statt *syn*) und *erythro* (statt *anti*).



VI. Nomenklatur von chiralen Verbindungen

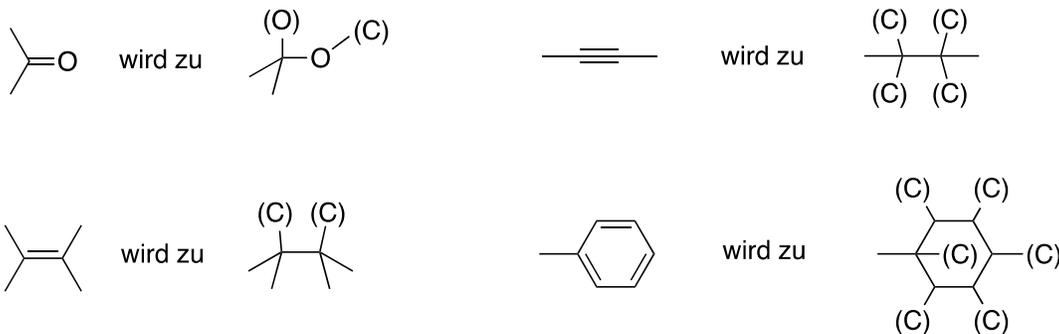
R/S-Nomenklatur/*CIP*-Nomenklatur: Heute verwendet man zur Benennung von Stereozentren meist die *CIP*-Nomenklatur nach Cahn, Ingold und Prelog. Hierbei wird die Priorität der vier Substituenten nach dem *CIP*-System festgelegt, wobei die Ordnungszahl (OZ) das bestimmende Rangordnungskriterium ist: höhere OZ = höhere Priorität:

1. Zunächst entscheidet die OZ der vier direkt am zu bestimmenden Stereozentrum befestigten Atome (1. Schale). Hierbei gilt also $I > Br > SO_3H > F > OH > CH_3 > H$.

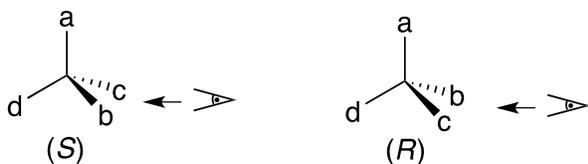
2. Bei Isotopen entscheidet das Atomgewicht, also $D > H$.

3. Unterscheiden sich die Atome der ersten Schale nicht, müssen deren Substituenten über die Priorität entscheiden. Bei gleichen Atomen höchster Priorität entscheidet dann der Substitutionsgrad, also deren Anzahl in den einzelnen Substituenten. Somit: $CCl_3 > COCl > COOR > COOH > CONH_2 > COR > CHO$.

4. Mehrfachbindungen werden durch Verdoppelung oder Verdreifachung unter Anbringung von Phantomatomen dargestellt. An die Enden der neuen Einfachbindung wird jeweils das doppelt gebundene Partneratom noch einmal einfach gebunden angehängt:

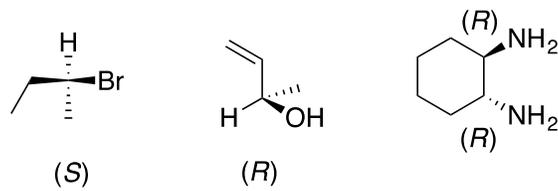


Nach Prioritätszuordnung wird dieses tetraedrische Kohlenstoffatom derart „gedreht“, dass der Substituent mit der niedrigsten Priorität nach hinten (also vom Betrachter weg) zeigt. Die Abfolge nach abnehmender Priorität der anderen drei Substituenten entspricht dann einer Rotation im Uhrzeigersinn (nach rechts: (*R*)-Konfiguration; von *rectus* = rechts) oder entgegen dem Uhrzeigersinn (nach links: (*S*)-Konfiguration; von *sinister* = links). Die Lage und Konfiguration werden vor dem systematischen Namen in Klammern (im Druck kursiv) angegeben.

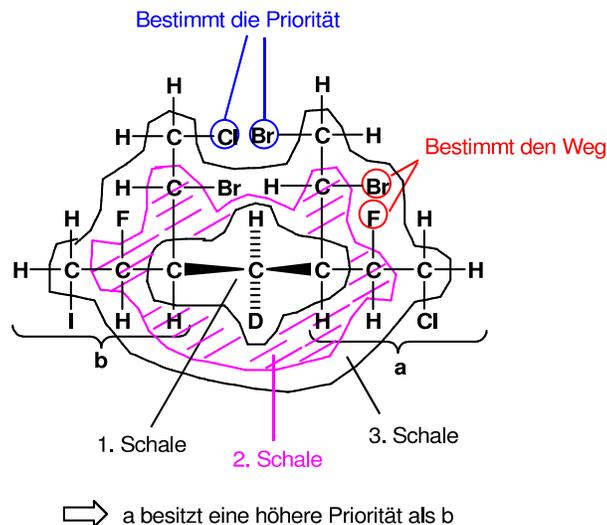


Die beiden Moleküle werden von rechts betrachtet, da d die kleinste Priorität hat.

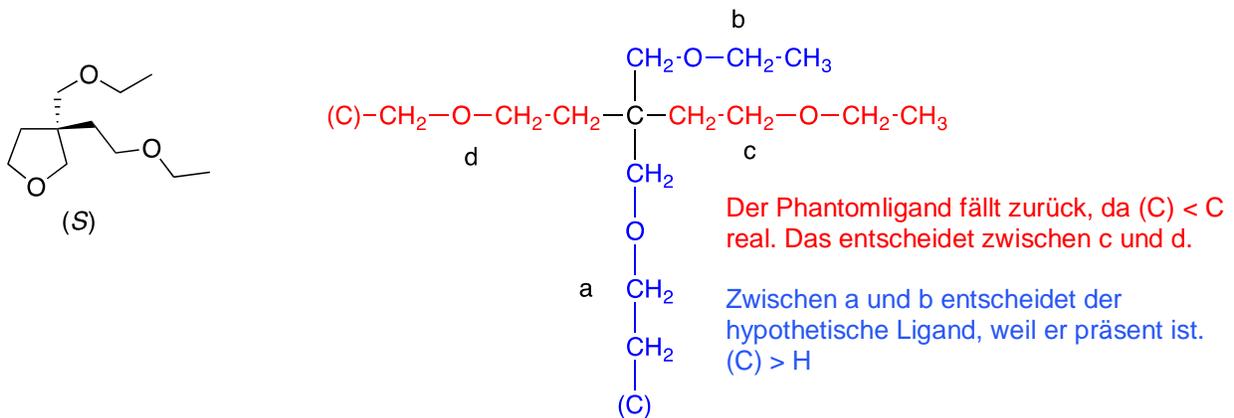
Priorität: $a > b > c > d$



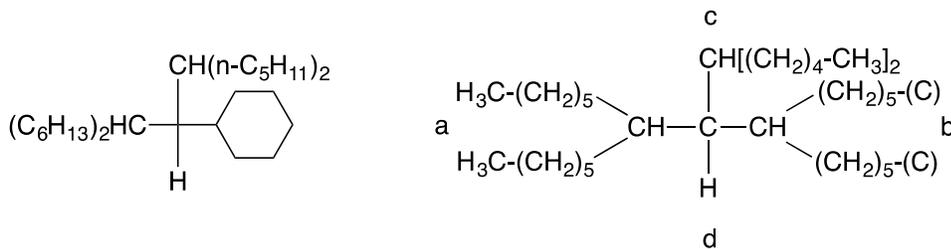
Nochmal: Kann man durch Betrachtung der Atome direkt am Stereozentrum keine Entscheidung bezüglich der Prioritäten fällen, so vergleicht man die korrespondierenden **Sphären/“Schalen“**. Zuerst vergleicht man die Atome in der ersten Schale. Dann geht man in die zweite Schale, etc. Hierbei folgt man immer dem Weg, auf dem die höheren Prioritäten erreicht werden. Das unten stehende, etwas komplexere Beispiel verdeutlicht, dass man immer dem Weg entlang der höheren Prioritäten folgt. Der Weg wird durch die Br- bzw. F-Atome in der zweiten Schale festgelegt. Man muss den Weg nehmen, der über die höher priorisierten Atome führt.



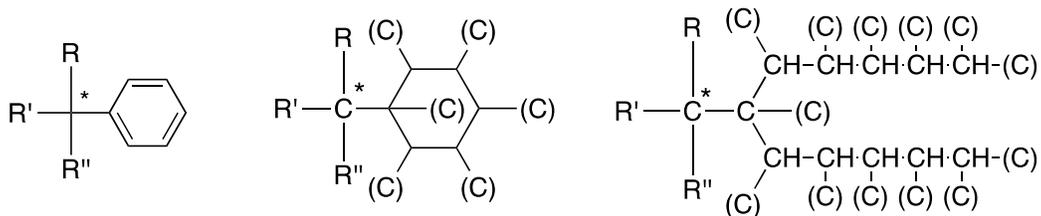
Weiterführende Regeln und Beispiele der *R/S*-Nomenklatur: Auch *cyclische* Verbindungen müssen aufgelöst werden. Man überführt diese in eine *acyclische* Baumstruktur. Hierbei geht man vom Knotenpunkt (z. B. dem Stereozentrum) in beide Richtungen, bis der Verzweigungspunkt wieder erreicht ist. An dieser Stelle wird die *cyclische* Struktur geöffnet und ein Phantomatom eingeführt, das dem Knotenatom entspricht. Das Phantomatom hat dabei eine geringere Priorität als ein reales Atom, aber es ist höher gewichtet als ein Atom kleinerer OZ. Das wird am Beispiel unten deutlich.



Ein weiteres Beispiel, das die Auflösung von Ringstrukturen untermauert:



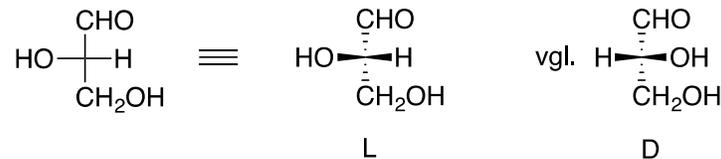
Wie geht man mit Phenylringen um? Auch diese müssen aufgelöst werden. Zuerst ergänzt man mit Phantomatomen gemäß der Doppelbindungsregel, dann schneidet man den Ring auf.



Fischer-Nomenklatur

Die Darstellung von Verbindungen mit einem oder mehreren Chiralitätszentren kann durch die Fischer-Projektion (Emil Fischer) erfolgen: Hierbei wird die Kohlenstoff-Hauptkette, die längste Kohlenstoffkette, vertikal angeordnet. Das C-Atom mit der höchsten Oxidationsstufe wird nach oben geschrieben und erhält damit die niedrigste Stellungsnummer. Übereinkunftsgemäß zeigen in der Fischerprojektion die vertikalen Bindungen nach hinten, die horizontalen Bindungen kommen aus der Papierebene nach vorne heraus. Unten wird das Prinzip am Beispiel des Glycerinaldehyds verdeutlicht.

Beispiel: einfachster Zucker: Glycerinaldehyd (in Fischer-Projektion)

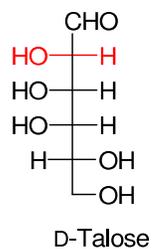
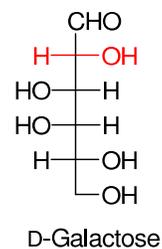
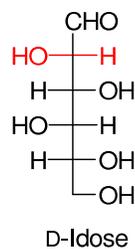
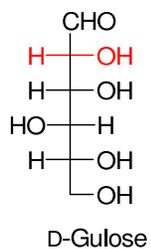
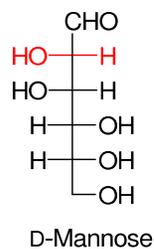
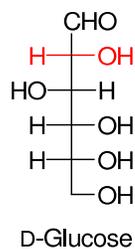
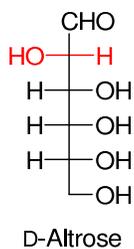
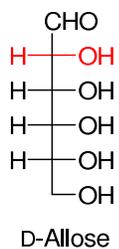
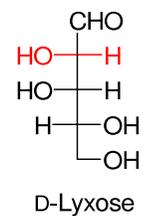
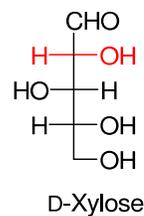
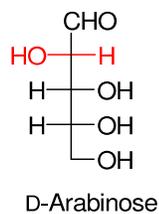
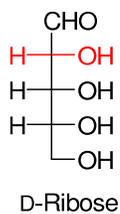
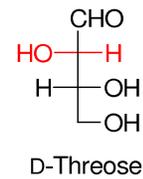
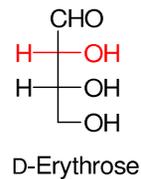
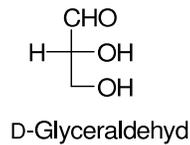


L, D : Bezeichnet, ob am stereogenen Zentrum, welches am weitesten vom höchstoxidierten C-Atom entfernt ist, die OH- oder eine andere Gruppe links (L, von laevus = links) oder rechts (D, dexter = rechts) steht. Die planare Fischer-Projektion wird heute nur noch für Aminosäuren und Zucker verwendet.

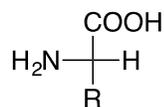
In einer Zeit, als keine Methoden zur Bestimmung der absoluten Konfiguration existierten, hat Emil Fischer dem rechtsdrehenden (α)-Glycerinaldehyd willkürlich die D-Konfiguration zugeordnet. Die von D-Glycerinaldehyd abgeleiteten chiralen Verbindungen wurden ebenfalls als D-Enantiomere bezeichnet, ebenso wie die aus L-Glycerinaldehyd erhaltenen als L-Enantiomere bezeichnet wurden. Hierdurch war ein nützliches Relativsystem der Stereochemie geboren und man konnte anderen Wissenschaftlern eindeutig mitteilen, welches Enantiomer verwendet wurde. Bis heute ist die Bestimmung der absoluten Konfiguration einer Verbindung kein triviales Unterfangen und es dauerte nach der Fischerschen Festlegung noch 50 Jahre, bis einer chiralen Verbindung eindeutig die absolute Konfiguration zugeordnet wurde, wobei sich herausstellte, dass Fischers Zuordnung der echten Stereochemie entspricht.

Anmerkung: Man sollte die L/D-Nomenklatur nicht mit den kleinen Buchstaben l und d verwechseln, die oft nur den Drehsinn angeben, allerdings nicht verwendet werden sollten. Zucker haben in der Regel mehr als ein stereogenes C-Atom. Für die Zuordnung zur L- und D-Reihe der Zucker schreibt man die Hauptkette vertikal und betrachtet nur das Chiralitätszentrum, das vom höchstoxidierten C-Atom am weitesten entfernt ist. Viele natürlich vorkommende Zucker sind D-konfiguriert wie z. B. β -D-Glucose oder β -D-Desoxyribose. Die relative Konfiguration von Glucose wurde ebenfalls erstmals von Emil Fischer aufgeklärt – eine Meisterleistung.

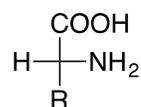
D-Serie der Zucker (rot hervorgehoben die neu eingefügte CH(OH)-Gruppe):



Auch Aminosäuren werden heute noch mit L oder D angegeben. Die natürlichen Aminosäuren sind meistens L-konfiguriert:



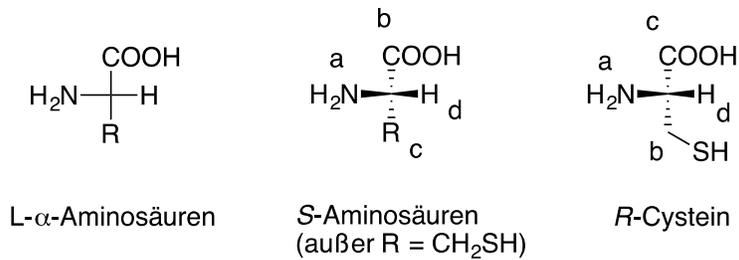
L- α -Aminosäuren



D- α -Aminosäuren

Nomenklatur für Aminosäuren

Die proteinogenen L- α -Aminosäuren besitzen alle die gleiche räumliche Orientierung und können daher durch eine allgemeine Formel dargestellt werden. Mit Ausnahme von Cystein haben alle diese Aminosäure zudem die *S*-Konfiguration. Da sich bei Cystein die Prioritätenreihenfolge aufgrund des Schwefelsubstituenten ändert, besitzt es *R*-Konfiguration.



Übersicht über die proteinogenen α -Aminosäuren:

