

OC 4 – Aromaten / Heteroaromaten

Prof. Waldvogel - OC 4

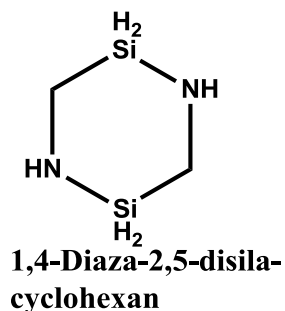
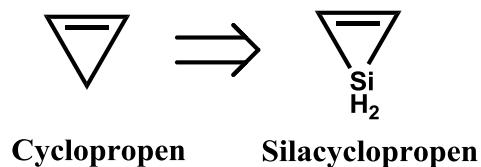
ბროტ, ლაგვიღობგვი - OC 4



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

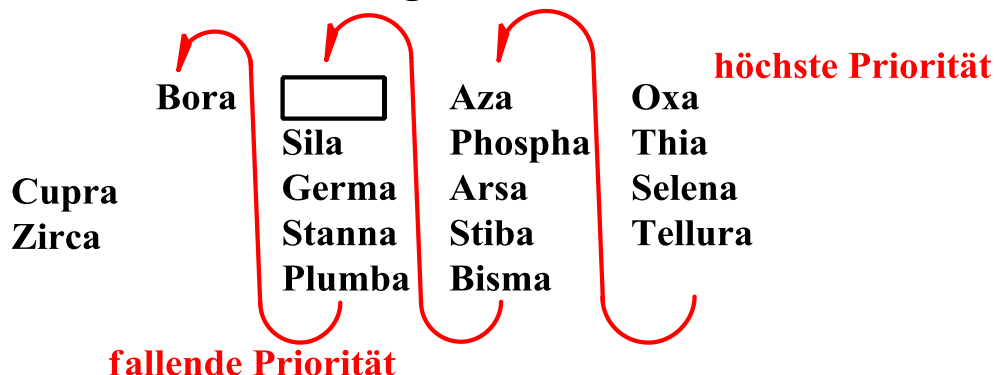
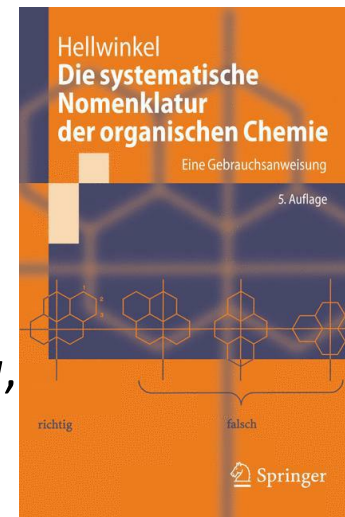
IUPAC-Nomenklatur a-Nomenklatur

• a = Austausch



⇒ **Priorität der Heteroatome**

- D. Hellwinkel, *Die systematische Nomenklatur der organischen Chemie. Eine Gebrauchsanweisung*, Springer, Berlin, **2005**, 5., korr., erw. u. erg. Aufl.



Prof. Waldvogel - OC 4

JG|U

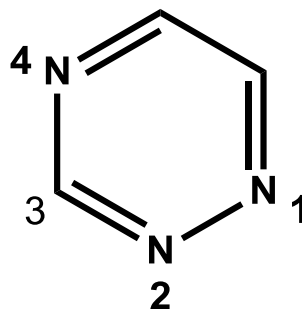
Bild: eingescanntes Cover

JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

- **Vorgehen**

- 1. Grundkörper suchen (oft Eigenname)**
- 2. Nummerierung: höchste Priorität bekommt die 1, nächstes Heteroatom bekommt eine möglichst kleine Zahl**
- 3. Ordnen der Präfixe nach abnehmender Priorität**

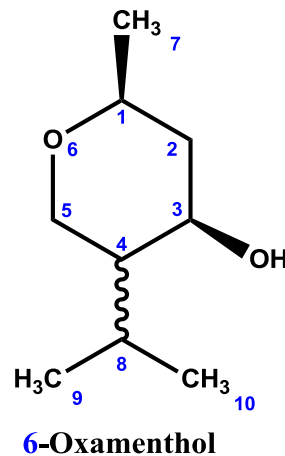
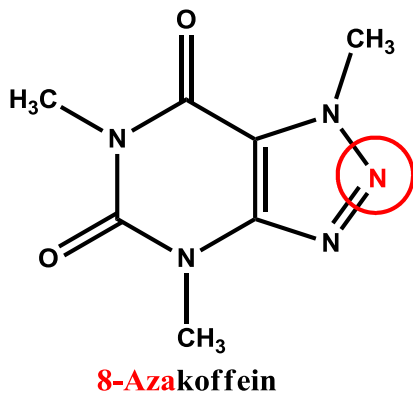
z.B.:



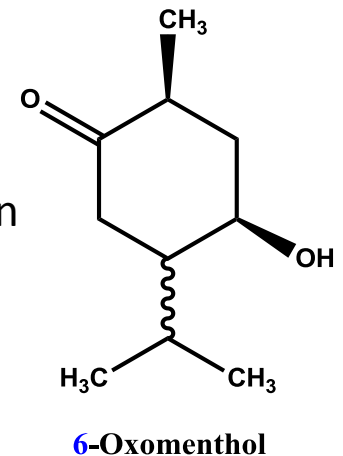
1,2,4-Triazin

- **Man verwendet immer ein bekanntes Gerüst um die Verwandtschaft zu demonstrieren, dabei wird die typische Zählweise des Gerüsts verwendet.**

z.B:



nicht zu verwechseln
mit



Aufpassen!

Hantsch-Widmann-Patterson-Nomenklatur

- Ringe mit Stickstoff als Heteroatom

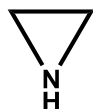
N-Haltig			
Ringgröße	ungesättigt	mit 1 Doppelbdg.	gesättigt
3	-irin	-	-iridin
4	-et	-etin	-etidin
5	-ol	-olin	-olidin
6	-in	hier wird mit „Hydro“ gearbeitet	
7	-epin		
8	-ocin		
9	-onin		
10	-ecin		

- **Ringe ohne Stickstoff als Heteroatom**

N-frei			
Ringgröße	ungesättigt	mit 1 Doppelbdg.	gesättigt
3	-iren	-	-iran
4	-et	-eten	-etan
5	-ol	-olen	-olan
6	-in		-inan (an)
7	-epin		-epan
8	-ocin		-ocan
9	-onin		-onan
10	-ecin		-ecan

• Beispiele

mit N:



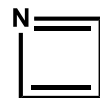
Aziridin



1H-Aziridin
(instabil, Anti-Aromat)



2H-Azirin
(Imin)



(Aza-et)
Azet



Azetidin

ohne N:

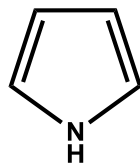


Oxiran

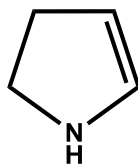


Oxiren

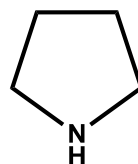
Problem: Trivialnamen, die akzeptiert sind:



(Azol)
Pyrrol



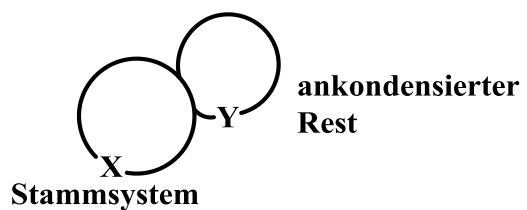
(Azolin)
2,3-Dihydropyrrol



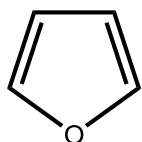
(Azolidin)
Pyrrolidin

Kenntnisse der Trivialnamen sind essentiell!

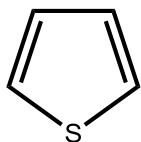
kondensierte Heterocyclen



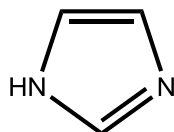
• ankondensierte Reste:



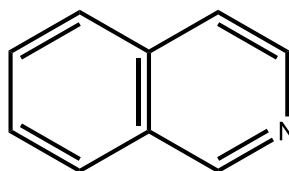
Fura
(Furano)



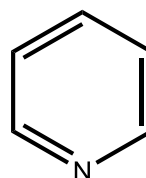
Thieno



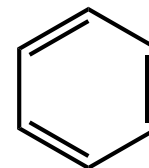
Imidazo



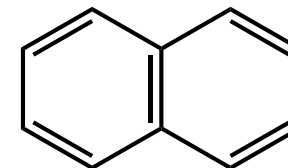
Isochino



Pyrido

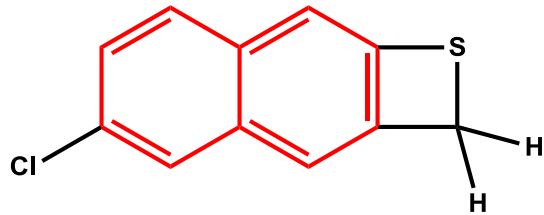


Benzo



Naphtho

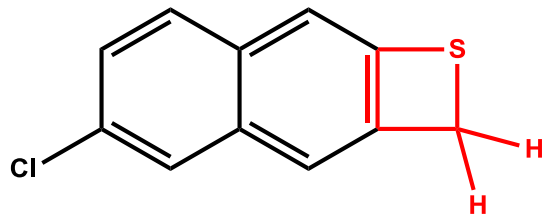
1. Regel: Stammsystem ist der Heterocyclus



naphtho

- **Rezept:**
 - **Suche nach bekannten Teilsystemen (Präfix mit Endung -o)**

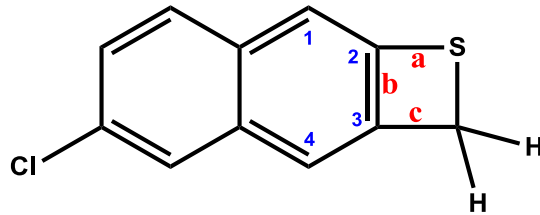
1. Regel: Stammsystem ist der Heterocyclus



naphtho-thieten

- **Rezept:**
 - **Suche nach bekannten Teilsystemen (Präfix mit Endung -o)**
 - **heterocyclisches Stammsystem**

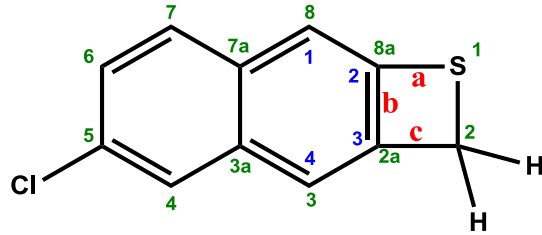
1. Regel: Stammsystem ist der Heterocyclus



naphtho[2,3-b]thieten

- **Rezept:**
 - **Suche nach bekannten Teilsystemen (Präfix mit Endung -o)**
 - **heterocyclisches Stammsystem**
 - **Verknüpfungsstelle []**
 - Basissystem: Bindungen mit Buchstaben auf kürzesten Weg zur Bindungsstelle, dabei die Heteroatome systematisch ablaufen**
 - ankondensierter Ring mit Zahlen, gemäß der systematischen Nummerierung des Fragmentes**

1. Regel: Stammsystem ist der Heterocyclus



2H-5-Chlornaphtho[2,3-b]thiethen

- **Rezept:**
 - **Suche nach bekannten Teilsystemen (Präfix mit Endung -o)**
 - **heterocyclisches Stammsystem**
 - **Verknüpfungsstelle []**
 - Basissystem: Bindungen mit Buchstaben auf kürzesten Weg zur Bindungsstelle, dabei die Heteroatome systematisch ablaufen**
 - ankondensierter Ring mit Zahlen, gemäß der systematischen Nummerierung des Fragmentes**
 - **Substituenten mit Peripheriezählweise (unabhängig von der Verknüpfung)**
- **Beginnend neben einer Brücke**
- **Vorzugsweise Heteroatom, stark bevorzugt Stickstoffatome**
- **Ring muss erst ganz abgelaufen werden**

Prof. Waldvogel - OC 4

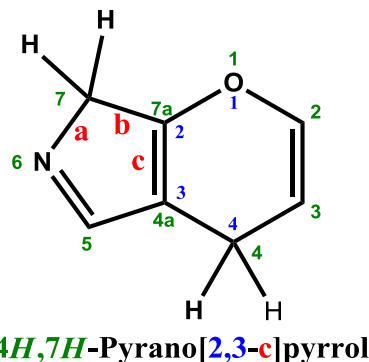
Prof. Waldvogel - OC 4



JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

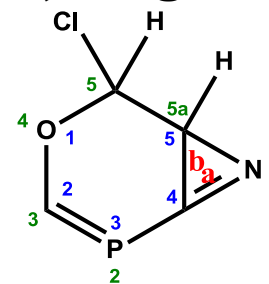
2. Regel

In Systemen mit mehreren Heterocyclen gibt der Ring mit Stickstoff den Ausschlag.



• Hinweise zur Bezifferung:

- **Suche Heteroatom zur Verknüpfungsstelle, möglichst N-Atom, wenn kein Heteroatom an der Verknüpfungsstelle da ist, dann C-Atom**
- **Heteroatome sollen möglichst kleine Zahlen erhalten, unabhängig von der Priorität**



5H,5aH-5-Chlor-
1,3-Oxaphosphino[4,5-*b*]azirin

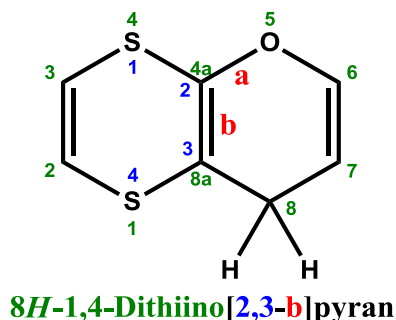
3. Regel

Wenn kein Stickstoff vorhanden ist, bestimmt das ranghöchste Element der „a“-Reihe das Stammsystem.

- **Hinweis zur Peripherinomenklatur:**

Wenn man in einem Ring anfängt zu zählen, so muss dieser erst abgearbeitet werden, kleinste Zahlen für die Heteroatome wählen

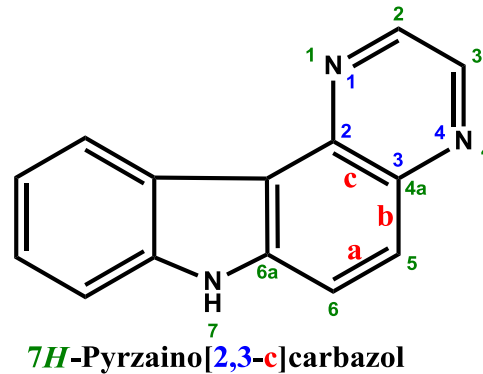
z.B.:



4. Regel

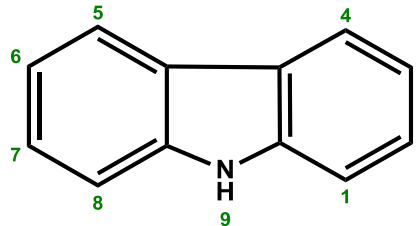
Trivialnamenkomponente mit den meisten Ringen erhält die höchste Priorität.

z.B.:



Wichtig ist die Kenntnis der Zählweise in den Komponenten:

z.B. Carbazol:



Prof. Waldvogel - OC 4

Prof. Waldvogel - OC 4

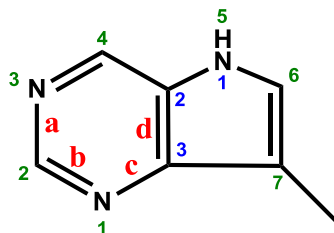


JOHANNES GUTENBERG
UNIVERSITÄT MAINZ

5. Regel

Der größere Ring gibt den Ausschlag.

z.B:

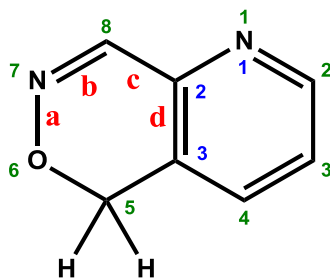


5H-7-Methyl-pyrrolo[3,2-d]pyrimidin

6. Regel

Die größere Anzahl der Heteroatome gibt den Ausschlag.

z.B:

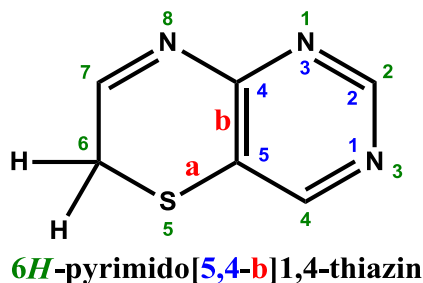


5H-Pyrido[2,3-d]oxazin

7. Regel

Die größere Vielfalt an Heteroatomen bestimmt das Stammsystem.

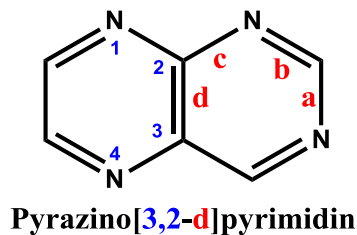
z.B:



8. Regel

Kleine Ziffern ergeben den Ausschlag.

z.B:

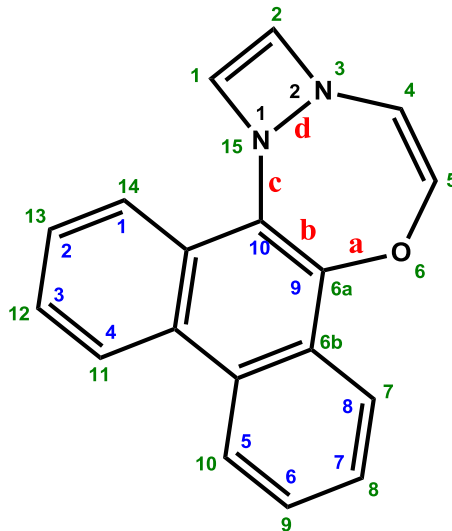


9. Regel

Orientierungsregel

- kleine Zahlen für Verknüpfungspunkte
 - C-Atome kleine Zahlen
 - N-Atome große Zahlen

- etwas kompliziertere Beispiele:
Heteroatome in Brücken bekommen eigene Nummern!



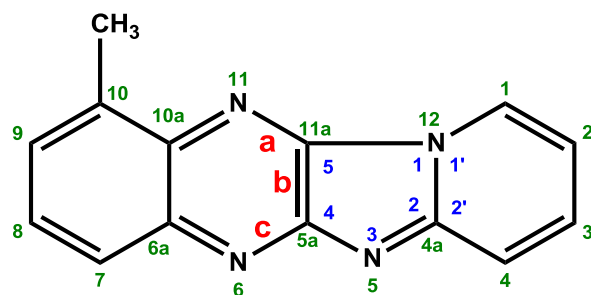
1,2-Diazetin[1,2-d]phenanthro[9,10-b]1,4,5-oxadiazepin

Prof. Waldvogel - OC 4

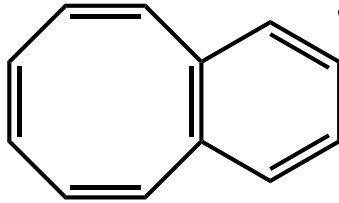
Prof. Waldvogel - OC 4



C-Brückenatome möglichst klein!

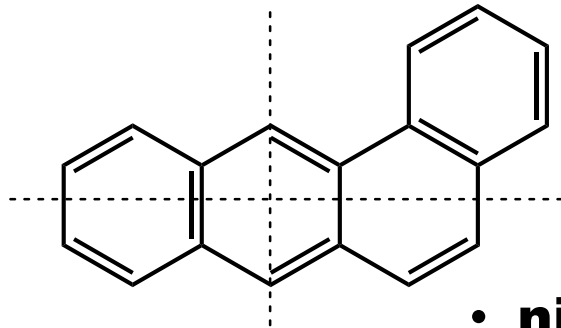


10-Methyl-pyrido[1',2'-1,2]imidazo[5,4-b]chinoxalin



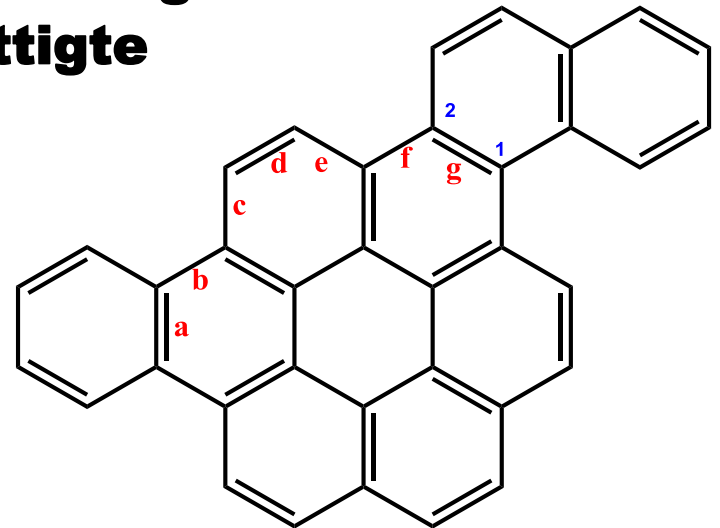
Benzocycloocten

- **neue Nomenklatur für große maximal ungesättigte Aromaten!**



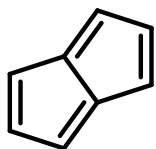
Benzo[a]anthracen

- **nicht als Phenanthren bezeichnen**

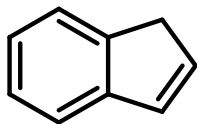


Benzo[a]naphtho[2,1-g]coronen

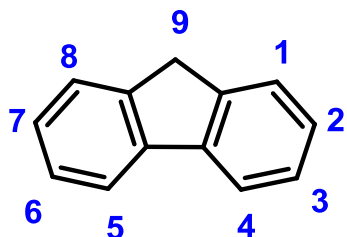
Arengrundkörper und abgeleitete Heterocyclen:



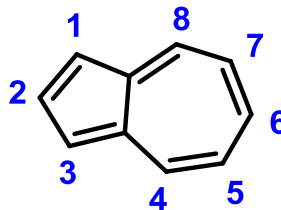
Pentalen



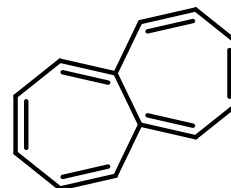
Indacen



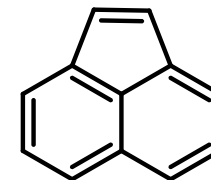
Fluoren



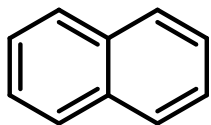
Azulen



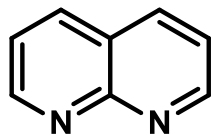
Heptalen



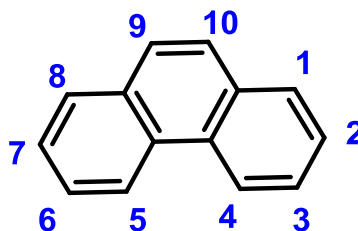
Acenaphthylen



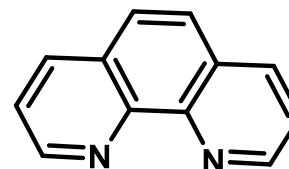
Naphthalin



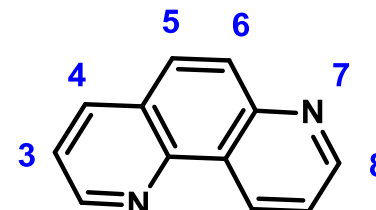
1,8-Naphthyridin



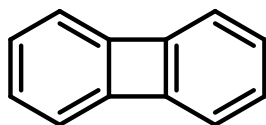
Phenanthren



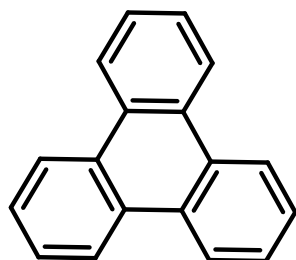
1,10-Phenandrolin



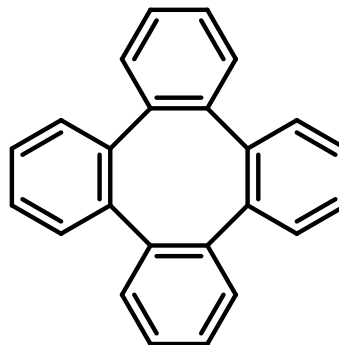
1,7-Phenandrolin



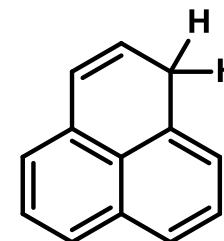
Biphenylen



Triphenylen

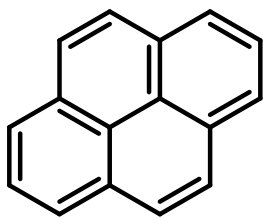


Tetraphenylen

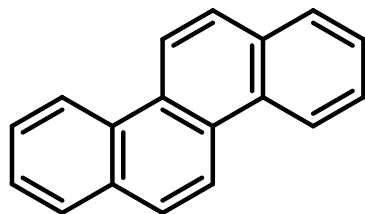


Phenalen

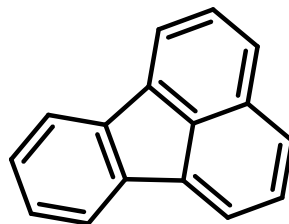
Arengrundkörper und abgeleitete Heterocyclen:



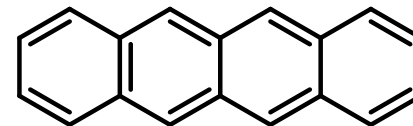
Pyren



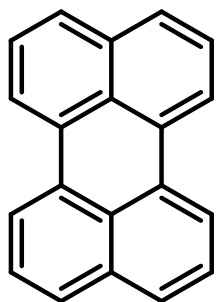
Crysen



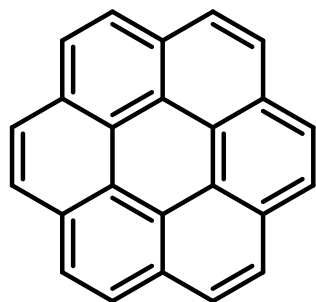
Fluoranthen



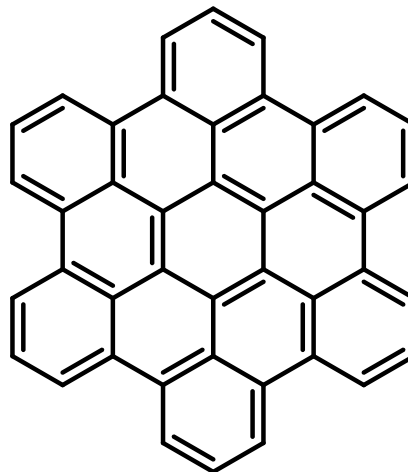
**Tetracen (früher
Naphthacen)**



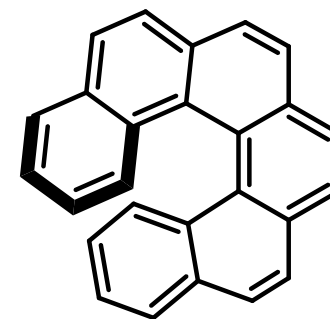
Perylen



Coronen

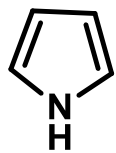


Hexabenzocoronen

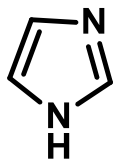


Hexahelicen

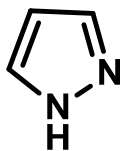
Fünfring-Heteroarene:



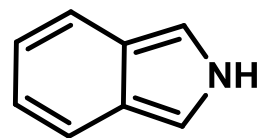
Pyrrol



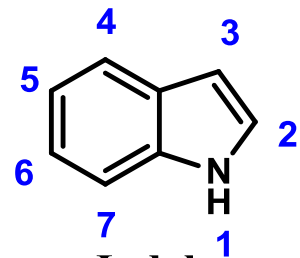
Imidazol



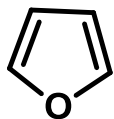
Pyrazol



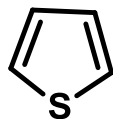
Isindol



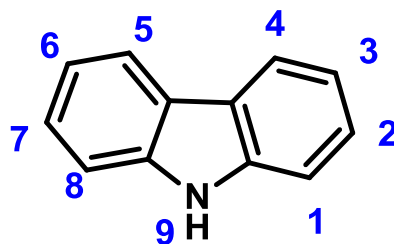
Indol



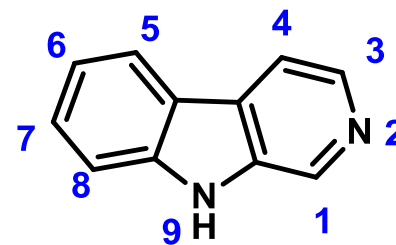
Furan



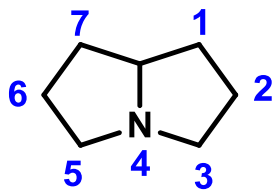
Thiophen



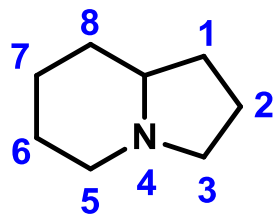
Carbazol



β-Carbolin

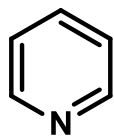


Pyrrolizidin

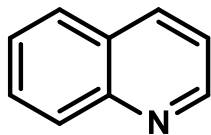


Indolizin

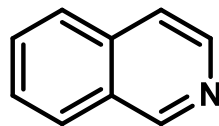
Sechsring-Heteroarene:



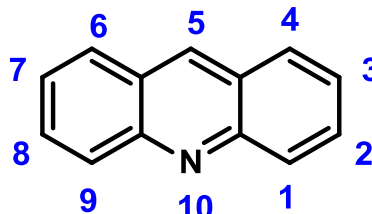
Pyridin



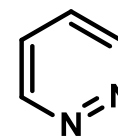
Chinolin



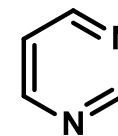
Isochinolin



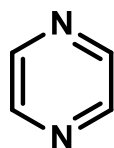
Acridin



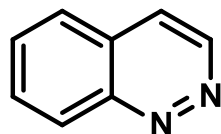
Pyridazin



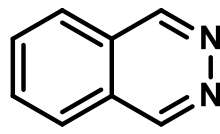
Pyrimidin



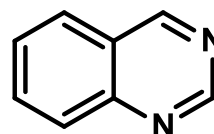
Pyrazin



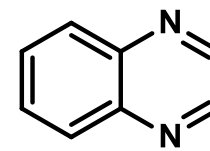
Cinnolin



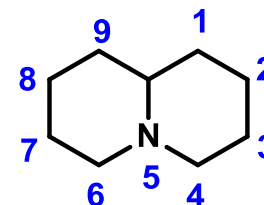
Phthalazin



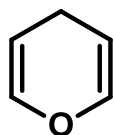
Chinazolin



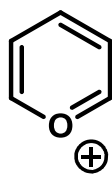
Chinoxalin



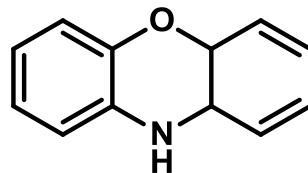
Chinolizidin



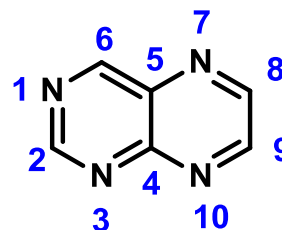
4H-Pyran



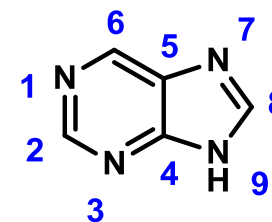
Pirylium



Phenoxazine



Pteridin



Purin