

1 Einleitung

Die stark wachsende Zahl neuer Verbindungen im Bereich der organischen Chemie machte es notwendig eine allgemeinverbindliche und systematische Nomenklatur zu entwickeln, welche es erlauben sollte, direkt aus dem Namen die chemische Struktur abzuleiten und vice versa. Ursprünglich lag die Namensgebung einer neuen chemischen Verbindung weitgehend, wenn nicht ausschließlich, in den Händen des Entdeckers, der diesen im besten Fall von einer sinnlichen Wahrnehmung ableitete, in der Regel aber von der Intuition geleitet wurde.

Die Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) war die erste Organisation, die ein einheitliches, systematisches Nomenklatorsystem einführte. Um den Widerstand der älteren Generation, die noch vorwiegend mit Trivialnamen bzw. Semitrivialnamen agiert hat, möglichst gering zu halten, wurden häufig benutzte Trivialnamen vollkommen beibehalten und die weniger geläufigen für systematische Namen als Alternative immer noch erlaubt.

Im Jahr 1972 begannen die Chemical Abstracts (CAs) mit dem 1. Band des neunten Collective Index (Bd. 76) ihre Regeln zur Benennung von chemischen Verbindungen vollkommen zu überarbeiten und nur mehr systematische Namen zu verwenden. Ausschlaggebend dafür waren die folgenden Punkte:

- a) um 250000 neue Verbindungen pro Jahr benennen zu können
- b) um eine einheitliche Namensgebung für ein und dieselbe Verbindung auch durch verschiedene Personen zu gewährleisten
- c) um eine Automation der Umsetzung von Strukturen in Namen und vice versa zu erleichtern
- d) um die Suche von chemischen Verbindungen über ihren Namen zu erleichtern
- e) um die Zahl der Indexeinträge zu verringern

Die Nomenklatur der CAs ist über weite Bereiche ident mit der, die von der IUPAC vorgeschlagen wurde. Im Gegensatz zur IUPAC-Nomenklatur werden in den CAs aber Zweit- oder sogar Drittnamen nicht verwendet und sind auch nicht erlaubt. Der Grund hierfür liegt einfach darin, daß die Verwendung dieser zusätzlichen Namen eine so große Zahl an Querverweisen notwendig machen und damit den Rahmen der CAs sprengen würde.

Die Vorlesung und das vorliegende Skriptum werden sich ausschließlich mit der innerhalb der CAs verwendeten Nomenklatur beschäftigen, wobei die nicht invertierte Schreibweise verwendet werden wird.

2 Grundtypen der Nomenklatur

Trivialname: kein systematischer Bestandteil; z.B. Chlorophyll, Thiophen, Furan

Semitrivialname (halbsystematischer Name): meist nur eine Endung als systematischer Bestandteil; z.B. Citral

Systematischer Name: nur aus systematischen Silben und Chiffren aufgebaut; z.B. Oxazol

Stammbezeichnung: bezeichnet das Grundgerüst und gegebenenfalls eine funktionelle Gruppe; das Grundgerüst kann trivial oder systematisch bezeichnet sein; z.B. Hexan, 2-Thiophencarbonsäure, 1,3,5-Pentantricarbonsäure

Substitutionsname: ein Wasserstoffatom wird durch ein anderes Atom oder eine Gruppe ersetzt; z.B. Chlorbenzol

Austauschname: ein Kohlenstoffatom wird durch ein Heteroatom ersetzt (Oxa-Aza-Nomenklatur), z.B. 7-Azabicyclo[2.2.1.]heptan

Radikofunktionaler Name: Stammsysteme wird als Radikal behandelt und mit Funktion unmittelbar zusammengefaßt, z.B. Acetylchlorid, Butylalkohol

Verbundname (Konjunktivnomenklatur): Vereinigung zweier Moleküle unter Abzug von 2 Wasserstoffen zu einem neuen Stammsystem, z.B. Naphthalinessigsäure

Verschmelzungsname (Anellierungsname): Zwei Ringsysteme sind durch eine gemeinsame Kante miteinander verbunden; die Namen der Einzelringe werden mit der Zwischensilbe -o- verbunden, z.B. Benzofuran

Substraktivname: Spezielle Atome bzw. Gruppen sind je nach Prae- bzw. Suffix vom Stammbegriff abzuziehen; Namen mit den Endungen -en und -in oder den Vorsilben anhydro-, dehydro-, desoxy-, nor-, z.B. Norbornan

Additivname: Addition von Atomen bzw. Gruppen an eine Stammstruktur, z.B. Styroloxid, Tetrahydrofuran

3 Grundlagen der CA - Nomenklatur

Die Nomenklatur innerhalb der CAs baut auf dem System der Stammverbindungen auf, die durch die Verwendung entsprechender strukturmodifizierender Vor- (Prae-), Zwischen- (In-) und Nach-Silben (Suffixen) zu den Verbindungsnamen zusammengesetzt werden. Als Stammsysteme kommen solche ohne Funktionalität (acyclische oder cyclische Kohlenwasserstoffe, Heterocyclen) oder mit funktioneller Gruppe in Frage, wobei die Kombination mit der funktionellen Gruppe nach genau abgestuften Prioritätsregeln erfolgt.

Die CAs verwenden die invertierte Nomenklatur, d.h. daß der Name der Stammverbindung vorangestellt und alles andere (Substituenten, Modifikationen, stereochemische Descriptoren) hintangereicht wird. Die alphabetische Auflistung erfolgt also auf Basis der Stammsysteme. Das hat den Vorteil, daß Verbindungen, die nur unterschiedlich substituiert, bzw. modifiziert sind, im alphabetischen Eintrag unter demselben Stammsystem zu finden sind.

3.1 Die Verwendung von Klammern

Jeder zusammengesetzte Substituent, d.h. jeder Substituent, der aus zwei unabhängig voneinander als Substituenten zu verwendenden Gruppen besteht, muß in einer Klammer zusammengefaßt werden, um Verwechslungen zu vermeiden. Als erste Klammer wird eine runde Klammer verwendet, alle folgenden Klammern sind eckig.

Abbildung 1: Beispiel zur Verwendung von Klammern



A: (Chlormethyl)silan

B: Chlormethylsilan

3.2 Multiplikative Vorsilben

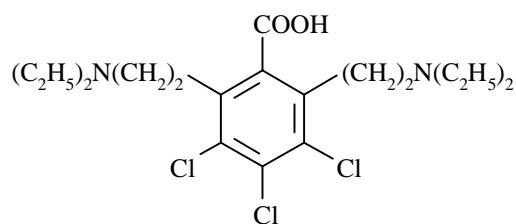
Normalerweise werden die Vorsilben die vom Griechischen abgeleitet werden (di-, tri-, tetra-, usw.) eher verwendet als die vom Lateinischen (bi-, ter-, quater-, usw.); Ausnahmen sind nona- (nicht ennea-) für neun, und undeca- (nicht hendeca-) für elf. Die lateinischen Vorsilben werden für Ringverknüpfungen verwendet.

Die Vorsilben bis-, tris-, tetrakis-, usw. werden für zusammengesetzte Substituenten, wenn ein Substituent mit einem Term wie Oxa- oder Aza- beginnt, und um Mißverständnissen vorzubeugen verwendet. Kommt ein Stammsystem öfter als einmal vor, so werden auf jeden Fall diese Vorsilben benutzt.

3.3 Alphabetisierung

Alle nicht zusammengesetzten Substituenten werden ohne Berücksichtigung von multiplikativen Vorsilben in eine alphabetische Reihenfolge gebracht. Bei zusammengesetzten Substituenten wird der erste Buchstabe des gesamten Radicals verwendet, auch wenn dieser aus einer multiplikativen Vorsilbe innerhalb des Substituenten stammt. Auch hier werden aber multiplikative Vorsilben, die sich auf den gesamten zusammengesetzten Substituenten beziehen, nicht berücksichtigt.

Abbildung 2: Beispiel zur Alphabetisierung



3,4,5-Trichlor-2,6-bis[2-(diethylamino)ethyl]benzoesäure

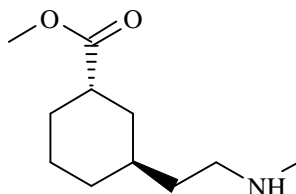
3.4 Kleinste Positionen

Alle Eigenschaften die durch Positionen gekennzeichnet sind, erhalten, soweit nicht andere Regeln vorzuziehen sind, eine möglichst kleine Position.

4 Aufbau eines Molekülnamens

- Bestimmung der funktionellen Gruppe höchster Priorität
- Bestimmung des Stammsystems
- Benennung des Restes der Verbindung in Form von Substituenten bzw. Modifikationen der Hauptfunktionen
- Angabe der Stereochemie, falls notwendig

Abbildung 3: Ableitung des Namens aus einer Struktur



[S-(trans)]-3-[2-(Methylamino)ethyl]cyclohexancarbonsäuremethylester
 invertiert: Cyclohexancarbonsäure, 3-[2-(methylamino)ethyl], methylester, [S-(trans)]

4.1 Bestimmung der funktionellen Gruppe höchster Priorität

- Freie Radikale und Verbindungen, für die keine substitutiven Vorsilben bekannt sind, z.B. Schwefeldiimid
- Kationische Verbindungen: koordinative Kationen, Onium (Aminium) Kationen
- Neutrale Koordinationsverbindungen einschließlich Metallocene
- Anionische Verbindungen: koordinative Anionen, Carbanionen, Anionen von Säuren, Alkoholen, Aminen
- Säuren: Peroxysäuren, Säuren in der Rangfolge: Carbon-, Schwefel-, Selen-, Telursäuren; Säuren, die als funktionelle Stammverbindungen ausgedrückt werden: Kohlen-, Chalcogen-, Stickstoff-, Phosphor-, Arsen-, Antimon-, Silicium-, Borsäuren
- Säurehalogenide in der gleichen Rangordnung wie die Säuren; dann, für jede Säure in der Reihenfolge: -fluorid, -chlorid, -bromid, -jodid, -azid, -isocyanat, -isothiocyanat, -isocyanid, -cyanid (gilt nicht für Carbonsäuren)
- Amide in der gleichen Rangordnung wie die Säuren
- Nitrile in der gleichen Rangordnung wie die Säuren
- Aldehyde, Thiale, Selenale, Tellurale
- Ketone, Thione, Selenone, Tellone

- k) Alkohole und Phenole, Thiole, Selenole, Tellurole
- l) Hydroperoxide
- m) Amine
- n) Imine (Das ist die letzte Verbindungsklasse, die durch ein Suffix ausgedrückt werden kann; alle folgenden Klassen sind nichtfunktionelle Verbindungen.)
- o) Stickstoffverbindungen: Formazan; heterocyclische; acyclische (nicht nach der Oxa-Aza-Nomenklatur benannt) wie Triazan, Disilazan, Hydrazin, Hydroxylamin, Thiohydroxylamin
- p) Phosphorverbindungen: heterocyclische; acyclische (nicht nach der Oxa-Aza-Nomenklatur benannt) wie Diphosphine, Phosphinoxid, Phosphinsulfid, Phosphinimid, Phosphoran, Phosphin
- q) Arsenverbindungen (wie Phosphorverbindungen)
- r) Antimonverbindungen (wie Phosphorverbindungen)
- s) Wismutverbindungen (wie Phosphorverbindungen)
- t) Borverbindungen: Carbapolyborane, Heteropolyboran, Polyborane, heterocyclische, Borane
- u) Siliciumverbindungen: heterocyclische; acyclische wie Trisilan, Disiloxan, Disilathian, Disilan, Silan
- v) Germaniumverbindungen (wie Siliciumverbindungen)
- w) Zinnverbindungen (wie Siliciumverbindungen)
- x) Bleiverbindungen (wie Siliciumverbindungen)
- y) Sauerstoffverbindungen: heterocyclische; acyclische Polyoxide wie Trioxide, Peroxide, nach Oxa-Aza-Nomenklatur benannte Verbindungen
- z) Schwefelverbindungen: heterocyclische; acyclische Polysulfide und ihre Oxide wie Trisulfone, Trisulfide, Disulfoxide, Disulfide, nach Oxa-Aza-Nomenklatur benannte Verbindungen
- aa) Selen- und Tellurverbindungen (wie Schwefelverbindungen)
- bb) Kohlenstoffverbindungen: carbocyclische, acyclische Kohlenwasserstoffe

4.2 Regeln zur Auswahl des Stammsystems

Zur Auswahl des bevorzugten Stammsystems sollten die folgenden Regeln der Reihe nach angewendet werden, solange bis eine Entscheidung gefällt werden kann:

- a) Größtmögliche Anzahl an funktionellen Gruppen höchster Priorität
- b) Auswahlkriterien zwischen cyclischen und acyclischen Stammsystemen
 - a) bevorzugtes Heteroatom (N, P, As, Sb, Bi, B, Si, Ge, Sn, Pb, O, S, Se, Te)
 - b) cyclisch bevorzugt
- c) Bevorzugtes Ringsystem
- d) Größtmögliche Anzahl an acyclischen Heteroatomen
- e) Größtes Indexstammsystem
- f) Größtmögliche Anzahl an am meisten bevorzugten acyclischen Heteroatomen (O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, Ti, B, Al, Hg)
- g) Größtmögliche Zahl an Mehrfachbindungen
 - a) Doppel- und/oder Dreifachbindungen
 - b) Doppelbindungen bevorzugt
- h) Niedrigste Position im Stammsystem für
 - a) Heteroatome
 - b) funktionelle Gruppen höchster Priorität
 - c) Mehrfachbindungen
 - d) Doppelbindungen

In den Fällen, in denen ein Stammsystem mehrmals vorkommt, werden die folgenden Regeln solange angewendet, bis eine Entscheidung möglich ist:

- i) Zentralität
- j) Größtmögliche Zahl an Substituenten
- k) Niedrigste Position im Stammsystem für Substituenten
- l) Multiplikation
- m) Früheste Indexposition des gesamten Namens

5 Wichtige funktionelle Gruppen und ihre Namen

Verbindungs-kategorie	Charakteristische Gruppe	Vorsilbe	Nachsilbe
Kation	$-N^+R_2$	-onio-	-onium+Gegenion
Carbonsäure ¹	-COOH	Carboxy-	-carbonsäure -säure
Peroxy-carbonsäure	COOOH		-peroxy-carbonsäure -peroxy-...-säure
Thio-carbonsäure	-COSH	Thiocarboxy-	-thio-carbonsäure -thio-säure
Dithio-carbonsäure	-CSSH	Dithiocarboxy-	-dithio-carbonsäure -dithio-säure
Sulfonsäure	$-SO_3H$	Sulfo-	-sulfonsäure
Sulfinsäure	$-SO_2H$	Sulfino-	-sulfinsäure
Sulfensäure	-SOH	Sulfeno-	-sulfensäure
Carbonsäuresalz	-COOM	M-carboxylato	M-...-carboxylat M-...-oat
Sulfonsäuresalz	$-SO_3M$	M-sulfonato-	M-...-sulfonat
Sulfinsäuresalz	$-SO_2M$	M-sulfinato-	M-...-sulfinat
Sulfensäuresalz	-SOM	M-sulfenato-	M-...-sulfenat
Carbonsäureanhydride	-COOCO-		-säure-...-säureanhydrid
Carbonsäureester	-COOR	-yloxycarbonyl-	-carbonsäure, -ylester -säure, -ylester
Sulfonsäureester	$-SO_3R$	-yloxysulfonyl-	-sulfonsäure, -ylester
Sulfinsäureester	$-SO_2R$	-yloxysulfinyl-	-sulfinsäure, -ylester
Sulfensäureester	-SOR	-yloxysulfenyl-	-sulfensäure, -ylester
Carbonsäurehalogenid	-COX	Halogencarbonyl-	-carbonylhalogenid -oylhalogenid
Sulfonsäurehalogenid	$-SO_2X$	Halogensulfonyl-	-sulfonylhalogenid
Sulfinsäurehalogenid	-SOX	Halogensulfinyl-	-sulfinylhalogenid
Sulfensäurehalogenid	-SX	Halogensulfenyl-	-sulfenylhalogenid
Carbonsäureamide	-CONH ₂	Aminocarbonyl-	-carboxamid -amid
Carbonimidsäure	-C(NH)OH		-carboximidsäure -imidsäure
Hydrazonsäuren	-C(NHNH ₂)OH		-carbohydrazonsäure -hydrazonsäure
Sulfonsäureamide	$-SO_2NH_2$	Aminosulfonyl-	-sulfonamid
Sulfinsäureamide	$-SONH_2$	Aminosulfinyl-	-sulfinamid
Sulfensäureamide	$-SNH_2$	Aminosulfenyl-	-sulfenamid
Sulfonimidsäure	$-S(O)(NH)OH$		-sulfonimidsäure
Sulfinimidsäure	$-S(NH)OH$		-sulfinimidsäure
Nitrile	-CN	Cyano-	-carbonitril nitril
Aldehyde	-CHO	Formyl- Oxo-	-carbaldehyd -al
Thioaldehyde	-CHS	Thioformyl Thioxo-	-carbothialdehyd -thial
Ketone	RR'CO	Oxo-	-on
Thioketone	RR'CS	Thioxo-	-thion
Oxime	-CNOH	Hydroxyimino-	-al, oxim; -on, oxim
Hydrazone	-CNNH ₂	Hydrazono-	-al, hydrazon; -on, hydrazon
Alkohole, Phenole	-OH	Hydroxy-	-ol
Thiole	-SH	Mercapto-	-thiol

¹ Ist das Kohlenstoffatom der Säure im Stammsystem includiert, so spricht man von einer Säure, anderfalls von einer Carbonsäure.

Amine	-NH ₂	Amino-	-amin
Imine	=NH	Imino-	-imin

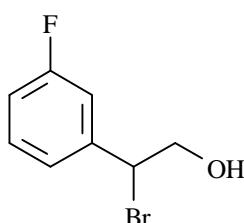
6 Nomenklatorsysteme zur Benennung von Stammsystemen

6.1 Die Konjunktivnomenklatur

Die hohe Präferenz für cyclische Systeme in der organischen Chemie und damit auch in der Nomenklatur, hat die Einführung dieses Nomenklaturtyps mit sich gebracht. Sie erlaubt es nämlich, daß ein Ring als Stammsystem verwendet wird, obwohl die funktionelle Gruppe höchster Priorität nicht direkt an diesen Ring gebunden, sondern durch eine aliphatische Kette von diesem getrennt ist.

Die Konjunktivnomenklatur wird immer dann verwendet, wenn ein Ringsystem vorliegt, an welches eine oder mehrere aliphatische Ketten gebunden sind, die wiederum die funktionelle Gruppe höchster Priorität tragen.

Abbildung 4: Beispiel zur Konjunktivnomenklatur



β -Brom-3-fluorbenzoethanol

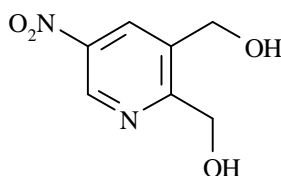
Der Name setzt immer voraus, daß an einem Ende der aliphatischen Kette der Ring sitzt und am anderen Ende die funktionelle Gruppe. Damit ergibt sich aber, daß Ketone per Definition nicht nach der Konjunktivnomenklatur benannt werden können.

6.1.1 Bezifferung in konjunktiv nomenklirten System

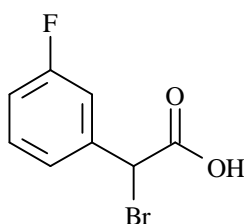
Die Positionen am Ring werden nach der üblichen Methode nummeriert, wobei die Verbindungsstelle zwischen Ring und Kette die kleinstmögliche Position erhält.

Für die Positionen der Kette werden Buchstaben aus dem griechischen Alphabet verwendet, wobei α die der funktionellen Gruppe höchster Priorität nächste Stelle ist, und dann in Richtung Ring fortgeschritten wird. Ist das Kohlenstoffatom der funktionellen Gruppe höchster Priorität nicht mehr substituierbar, so wird das nächste Atom zur α -Position.

Abbildung 5: Beispiele zur Bezifferung in der Konjunktivnomenklatur



5-Nitropyridin-2,3-dimethanol

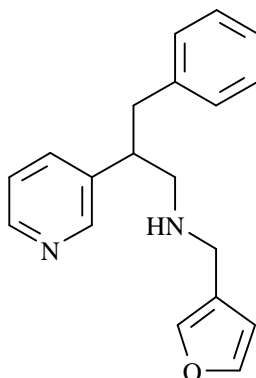


α -Brom-3-fluorbenzoesigsäure

6.1.2 Auswahl des Stammsystems für ein konjunktiv nomenklirtes System

Die allgemeinen Regeln (Kapitel 4.2) zur Auswahl eines Stammsystems werden auch hier angewendet.

Abbildung 6: Auswahl des Stammsystems in der Konjunktivnomenklatur



N-(3-Furylmethyl)-β-(phenylmethyl)-3-pyridinethanamin

Die anderen Systeme Benzoethanamin und 3-Furanmethanamin scheidet aus, weil stickstoffhaltige Heterocyclen höchste Priorität haben.

6.1.3 Ausschlußbedingungen für die Verwendung der Konjunktivnomenklatur

Der Ring muß über eine Einfachbindung mit der Kette verknüpft sein, und die Kette muß vollständig gesättigt sein und darf nur aus Kohlenstoffatomen bestehen.

Nur eine funktionelle Gruppe höchster Priorität pro Kette darf im konjunktiv nomenklirten Stammsystem inkludiert sein.

Die Regeln zur Auswahl des Stammsystems, v.a. die Regel „Größtmögliche Zahl an funktionellen Gruppen höchster Priorität“ darf nicht verletzt werden.

6.2 Monocyclische Stammsysteme

6.2.1 Das Hantzsch-Widman-System

Monocyclische Ringsysteme mit drei bis zehn Ringatomen und mindestens einem Heteroatom (außer Silicium) werden nach diesem System oder trivial benannt.

Die Namen in diesem System ergeben sich aus den entsprechenden Silben für die Heteroatome, multiplikativen Vorsilben, Ziffern für die Position der Heteroatome, und Endungen für die Ringgröße und den Grad der Sättigung. Für ein einzelnes Heteroatom wird keine Position angegeben.

Die Heteroatome werden in der Reihenfolge angegeben, in der sie bevorzugt sind (Kapitel 4.2 Punkt f)).

Die niedrigste Position erhält das Heteroatom mit der höchsten Priorität. Damit ergibt sich aber, daß die Bezifferung nicht unbedingt die kleinstmögliche sein muß.

Trifft der Vokal „a“ auf einen anderen, so wird er ausgelassen; z.B. Dioxazol und nicht Dioxaazaole.

6.2.1.1 Silben für Heteroatome

Element	Oxidationsstufe	Präfix
Sauerstoff	II	oxa
Schwefel	II	thia
Selen	II	selena
Tellur	II	telura
Stickstoff	III	aza
Phosphor	III	phospha ^{*)}
Arsen	III	arsa ^{*)}
Antimon	III	stiba ^{*)}
Wismuth	III	bisma
Silicon	IV	sila
Germanium	IV	germa ^{*)}
Zinn	IV	stanna
Blei	IV	plumba
Titan	IV	Titana
Bor	III	bora
Aluminium	III	alumina
Quecksilber	II	mercura

^{*)} Werden die durch Stern bezeichneten Heteroatomsilben von -in gefolgt, so werden an ihrer Stelle folgende Silben verwendet „phosphor“, „arsen“, „antimon“ und „german“.

6.2.1.2 Endungen für die Ringgröße und den Grad der Sättigung

Zahl der Ringatome	Ringe mit Stickstoff		Ringe ohne Stickstoff	
	ungesättigt ²	gesättigt	ungesättigt	gesättigt
3	-irin	-iridin	-iren	-iran
4	-et	-etidin	-et	-etan
5	-ol	-olidin	-ol	-olan
6	-in	³	-in	-an ⁴
7	-epin	³	-epin	-epan
8	-ocin	³	-ocin	-ocan
9	-onin	³	-onin	-onan
10	-ecin	³	-ecin	-ecan

Ist ein System nur teilweise gesättigt, so wird vom ungesättigten Ring ausgegangen, und dieser durch Addition von Wasserstoff in den entsprechenden Sättigungszustand gebracht.

6.2.2 Austauschnamen für Heterocyclen

Alle Ringe mit mehr als zehn Ringatomen, die kein Silicium beinhalten, werden mittels der „Oxa-Aza-Nomenklatur“ bezeichnet.

Dazu werden die Namen der entsprechenden Carbocyclen herangezogen, und diesen die Silben für die Heteroatome, die Zahl der Heteroatome, sowie die Ziffern für die Position der Heteroatome vorangestellt.

² Maximal mögliche Zahl an nicht kumulierten Doppelbindungen bei Vorliegen der Heteroatome in den vorher angegebenen Oxidationsstufen.

³ Sättigung wird durch Verwendung der Vorsilben di-, tetra-, oder hexahydro ausgedrückt. Perhydro wird nicht verwendet.

⁴ Diese Endung wird bei Ringsystemen, in denen Silicium, Germanium, Zinn, Titan oder Blei vorkommt nicht verwendet. Die Sättigung wird durch Wasserstoffaddition zum Ausdruck gebracht. Für gesättigte Sechseringe mit Bor oder Phosphor wird die Endung -inan verwendet.

Die Abfolge der Heteroatome folgt der Liste in Kapitel 6.2.1.1.

Das Heteroatom höchster Priorität erhält die niedrigste Nummer; erst die weiteren Heteroatome folgen dem Kriterium der kleinsten Positionen im allgemeinen.

Abbildung 7: Beispiel für einen Ring mit „Oxa-Aza-Nomenklatur“



1-Oxa-3-thia-11-azacyclotetradeca-4,7,9-trien

1-Oxa-11-thia-3-azacyclotetradeca-4,7,9-trien

6.2.3 Heterocyclen mit Silicium

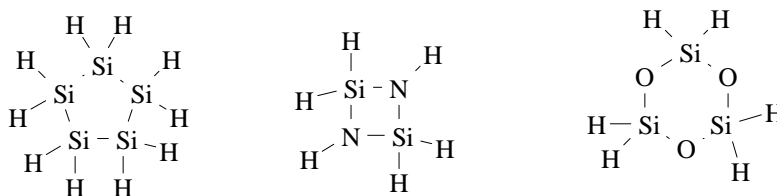
Im allgemeinen werden Ringe die Silicium enthalten mittels der „Oxa-Aza-Nomenklatur“ bezeichnet (Siehe Kapitel 6.2.2).

Ringe, die nur aus Silicium bzw. Silicium abwechselnd mit Stickstoff oder einem Chalcogen bestehen, werden so bezeichnet, daß den Namen der analogen acyclischen Verbindungen die Silbe „Cyclo-“ vorangestellt wird.

Die Namen der acyclischen Systeme lauten:

- Reine Siliciumverbindungen:
Silan, Disilan, Trisilan, usw.
- Silicium alternierend mit Stickstoff oder einem Chalcogen (Silicium und das andere Heteroatom werden als eine Einheit betrachtet):
Disilazan ($\text{SiH}_3\text{NHSiH}_3$), Trisilazan ($\text{SiH}_3\text{NHSiH}_2\text{NHSiH}_3$), usw.
Disiloxan ($\text{SiH}_3\text{OSiH}_3$), Trisiloxan ($\text{SiH}_3\text{OSiH}_2\text{OSiH}_3$), usw.
Disilathian ($\text{SiH}_3\text{SSiH}_3$), Trisilathian ($\text{SiH}_3\text{SSiH}_2\text{SSiH}_3$), usw.

Abbildung 8: Beispiele für Silicium hältige Ringe und ihre Namen



Cyclopentasilan

Cyclodisilazan

Cyclotrisiloxan

6.2.4 Monocyclische Heterosysteme mit Trivialnamen

Hantzsch-Widman-Name	Trivialer CA-Indexname
Azin	Pyridin
Hexahydroazin	Piperidin
Azol	Pyrrol (1 <i>H</i> -,2 <i>H</i> -,3 <i>H</i> -)
Azolidin	Pyrrolidin
1,2-Diazin	Pyridazin
1,3-Diazin	Pyrimidin
1,4-Diazin	Pyrazin
Hexahydro-1,4-Diazin	Piperazin

1,2-Diazol	Pyrazol (1 <i>H</i> -,3 <i>H</i> -,4 <i>H</i> -)
1,3-Diazol	Imidazol (1 <i>H</i> -,2 <i>H</i> -,4 <i>H</i> -)
1,2-Diazolidin	Pyrazolidin
1,3-Diazolidin	Imidazolidin
1,2,5-Oxadiazol	Furazan
1,2,5-Oxadiazolidin	Tetrahydrofurazan
Tetrahydro-2 <i>H</i> -1,4-oxazin	Morpholin
1,2-Oxazol	Isoxazol
1,2-Oxazolidin	Isoxazolidin
Oxin	Pyran (2 <i>H</i> -,4 <i>H</i> -)
Oxol	Furan
Oxolan	Tetrahydrofuran
1,2-Selenazol	Isoselenazol
1,2-Selenazolidin	Isoselenazolidin
Selenol	Selenophen
Selenolan	Tetrahydroselenophen
Tellurol	Tellurophen
Tellurolan	Tetrahydrotellurophen
Tetrahydro-2 <i>H</i> -1,4-thiazin	Thiomorpholin
1,2-Thiazol	Isothiazol
1,2-Thiazolidin	Isothiazolidin
Thiol	Thiophen
Thiolan	Tetrahydrothiophen
Thiin	Thiopyran (2 <i>H</i> -,4 <i>H</i> -)
Hexahydro-1,3,5,2,4,6-triazatriborin	Borazin
1,3,5,2,4,6-Trioxatriborinan	Boroxin
1,3,5,2,4,6-Trithiatriborinan	Borthiin

6.3 Polycyclische Stammsysteme

Polycyclische Stammsysteme können in folgende vier Klassen eingeteilt werden:

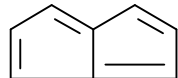
- Annelierte Systeme mit mindestens zwei Ringen, die mindestens 5 Ringatome besitzen, und nur durch ortho- oder ortho- und peri-Verknüpfung miteinander verbunden sind
- Überbrückte Systeme sind monocyclische oder annelierte Systeme, in denen verschiedene Teile des Systems noch zusätzlich über eine Brücke miteinander verbunden sind
- Spiroverbindungen besitzen zwei Ringe, die ein gemeinsames Atom besitzen
- Ringverbände besitzen zwei Ringe, die über eine Einfachbindung miteinander verknüpft sind

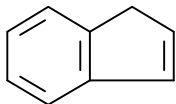
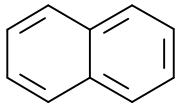
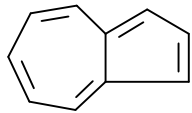
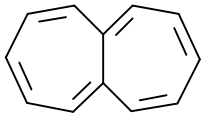
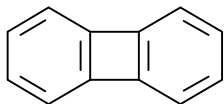
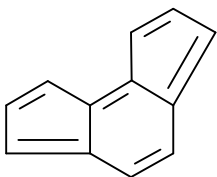
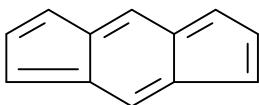
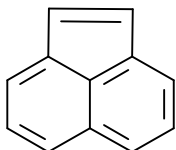
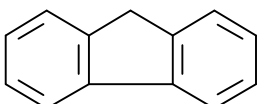
6.3.1 Annelierte Ringsysteme

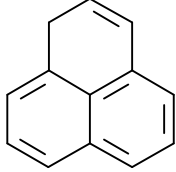
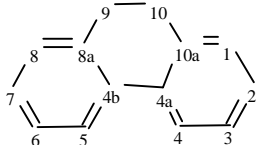
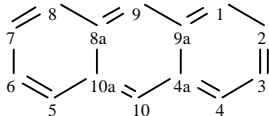
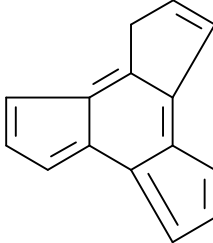
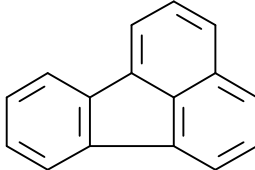
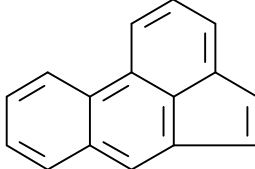
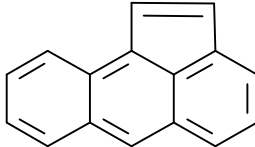
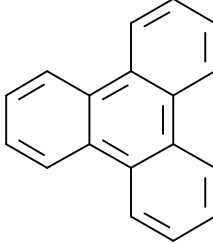
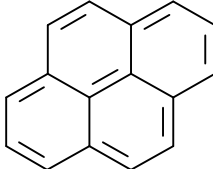
6.3.1.1 Trivial benannten Carbocyclen

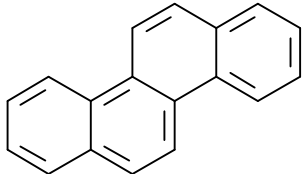
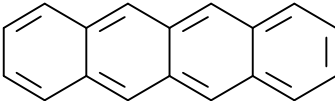
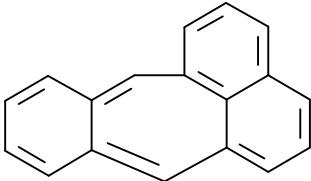
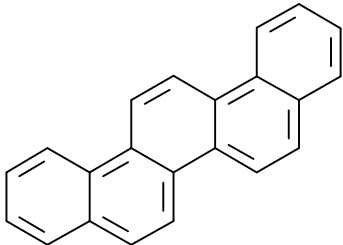
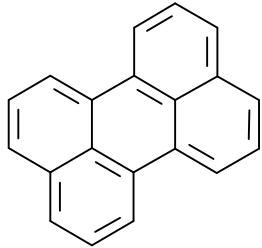
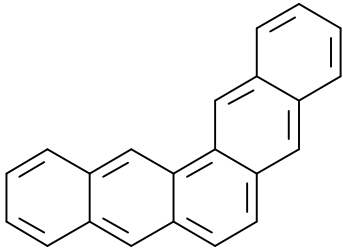
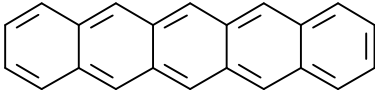
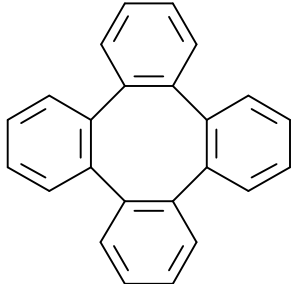
Die folgende Tabelle gibt trivial benannte Carbocyclen in der Reihenfolge an, in der sie als Basiskomponente für größere annelierte Systeme zu verwenden sind.

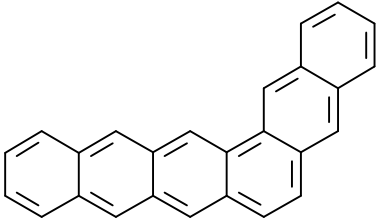
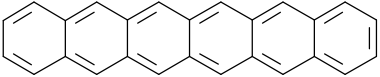
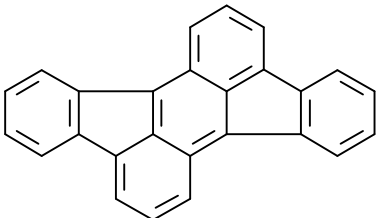
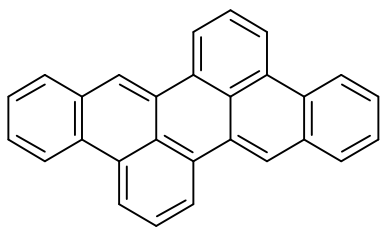
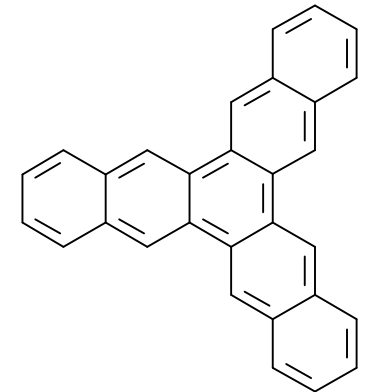
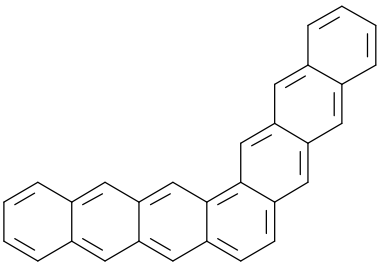
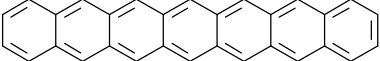
Die Ringsysteme Inden, Fluoren, Phenalen und Trinden benötigen für ihren Namen die Angabe von indiziertem Wasserstoff (siehe dort).

Name	Ringanalyse	Struktur
Pentalen	C ₅ -C ₅	

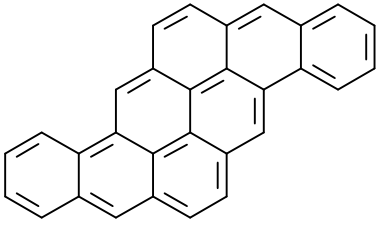
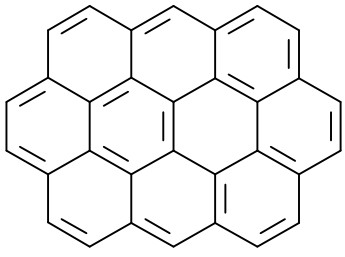
Inden	C_5-C_6	
Naphthalin	C_6-C_6	
Azulen	C_5-C_7	
Heptalen	C_7-C_7	
Biphenylen	$C_4-C_6-C_6$	
as-Indacen	$C_5-C_5-C_6$	
s-Indacen	$C_5-C_5-C_6$	
Acenaphthylen	$C_5-C_6-C_6$	
Fluoren	$C_5-C_6-C_6$	

Name	Ringanalyse	Struktur
Phenalen	$C_6-C_6-C_6$	
Phenanthren	$C_6-C_6-C_6$	
Anthracen	$C_6-C_6-C_6$	
Trinden	$C_5-C_5-C_5-C_6$	
Fluoranthen	$C_5-C_6-C_6-C_6$	
Acephanthrylen	$C_5-C_6-C_6-C_6$	
Aceanthrylen	$C_5-C_6-C_6-C_6$	
Triphenylen	$C_6-C_6-C_6-C_6$	
Pyren	$C_6-C_6-C_6-C_6$	

Name	Ringanalyse	Struktur
Chrysen	$C_6-C_6-C_6-C_6$	
Naphthacen	$C_6-C_6-C_6-C_6$	
Pleiaden	$C_6-C_6-C_6-C_7$	
Picen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Perylen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Pentaphen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Pentacen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Tetraphenylen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_8$	

Name	Ringanalyse	Struktur
Hexaphen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Hexacen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Rubicen	$C_5-C_5-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Coronen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Trinaphthylen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Heptaphen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Heptacen ⁵	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	

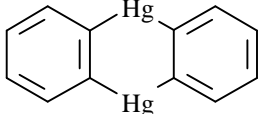
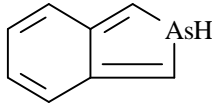
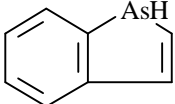
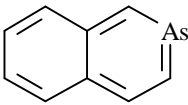
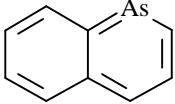
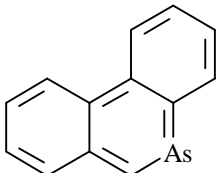
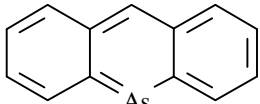
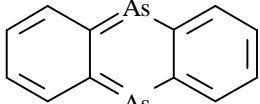
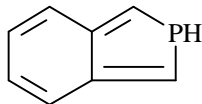
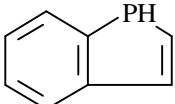
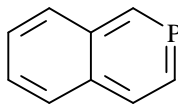
⁵ Kann sinngemäß weitergeführt werden: Octacen, Nonacen, usw.

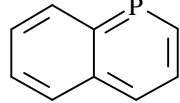
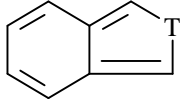
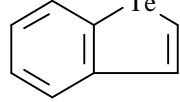
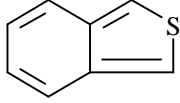
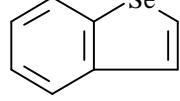
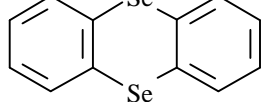
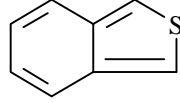
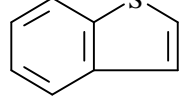
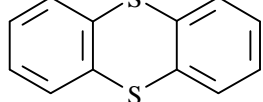
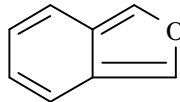
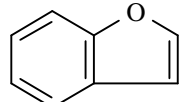
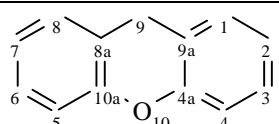
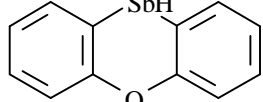
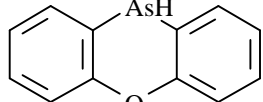
Name	Ringanalyse	Struktur
Pyranthren	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Ovalen	$C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	

6.3.1.2 Trivial benannte Heterocyclen

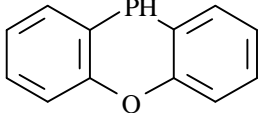
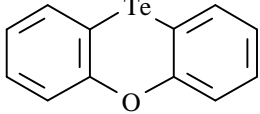
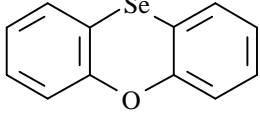
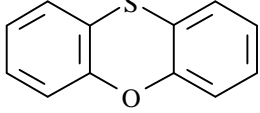
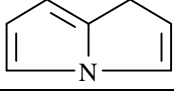
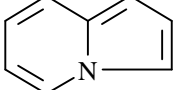
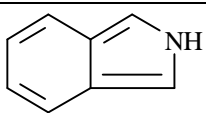
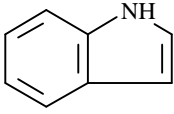
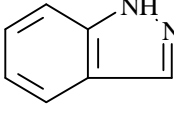
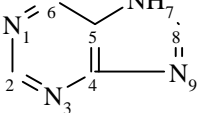
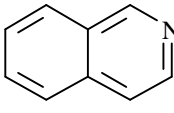
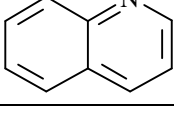
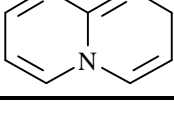
Die folgende Tabelle gibt trivial benannte Heterocyclen in der Reihenfolge an, in der sie als Basiskomponente für größere annelierte Systeme zu verwenden sind. Alle Heterocyclen besitzen eine höhere Präferenz als Carbocyclen.

Für folgende Ringsysteme muß, wenn sie alleine stehen, zur vollständigen Beschreibung der indizierte Wasserstoff angegeben werden: Isoarsindol, Arsindol, Isophosphindol, Phosphindol, Pyran, Xanthen, Phenoxantimonin, Phenoxarsin, Phenoxaphosphin, Pyrrol, Imidazol, Pyrazol, Pyrrolizin, Isoindol, Indol, Indazol, Purin, Chinolizin, Carbazol, Perimidin, Phenomercazin, Phenotellurazin, Phenoselenazin, Phenothiazin, Phenoxazin, Chindolin, Chinindolin, Phthaloperin, Acrindolin.

Name	Ringanalyse	Struktur
Phenomercurin	$C_4Hg_2-C_6-C_6$	
Isoarsindol	C_4As-C_6	
Arsindol	C_4As-C_6	
Isoarsinolin	C_5As-C_6	
Arsinolin	C_5As-C_6	
Arsanthridin	$C_5As-C_6-C_6$	
Acridarsin	$C_5As-C_6-C_6$	
Arsanthren	$C_4As_2-C_6-C_6$	
Isophosphindol	C_4P-C_6	
Phosphindol	C_4P-C_6	
Isophosphinolin	C_5P-C_6	

Name	Ringanalyse	Struktur
Phosphinolin	C_5P-C_6	
Benzo[c]tellurophen	C_4Te-C_6	
Benzo[b]tellurophen	C_4Te-C_6	
Benzo[c]selenophen	C_4Se-C_6	
Benzo[b]selenophen	C_4Se-C_6	
Selenanthren	$C_4Se_2-C_6-C_6$	
Benzo[c]thiophen	C_4S-C_6	
Benzo[b]thiophen	C_4S-C_6	
Thianthren	$C_4S_2-C_6-C_6$	
Isobenzofuran	C_4O-C_6	
Benzofuran	C_4O-C_6	
Xanthen ⁶	$C_5O-C_6-C_6$	
Phenoxantimonin	$C_4OSb-C_6-C_6$	
Phenoxarsin	$C_4AsO-C_6-C_6$	

⁶ Analog werden die Schwefel und Selenverbindung Thioxanthen und Selenoxanthen bezeichnet.

Name	Ringanalyse	Struktur
Phenoxaphosphin	$C_4OP-C_6-C_6$	
Phenoxatellurin	$C_4OTe-C_6-C_6$	
Phenoxaselenin	$C_4OSe-C_6-C_6$	
Phenoxathiin	$C_4OS-C_6-C_6$	
Pyrrrolizin	C_4N-C_4N	
Indolizin	C_4N-C_5N	
Isoindol	C_4N-C_6	
Indol	C_4N-C_6	
Indazol	$C_3N_2-C_6$	
Purin	$C_3N_2-C_4N_2$	
Isochinolin ⁷	C_5N-C_6	
Chinolin	C_5N-C_6	
Chinolizin ⁸	C_5N-C_5N	

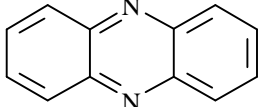
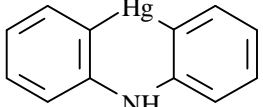
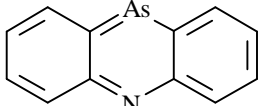
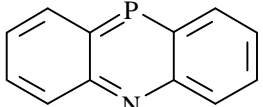
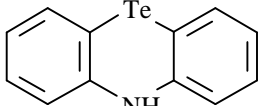
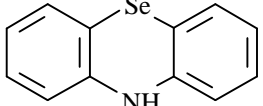
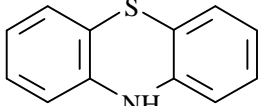
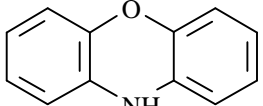
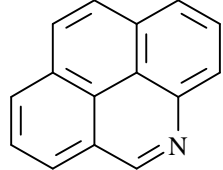
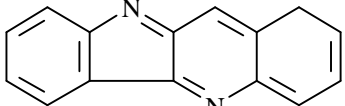
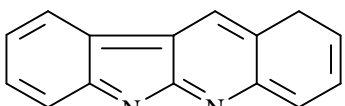
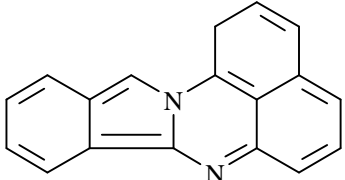
⁷ Alle Chinoline werden im Englischen mit Qu geschrieben (z.B. Isoquinoline).

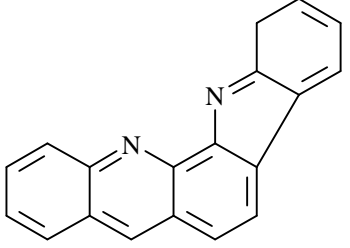
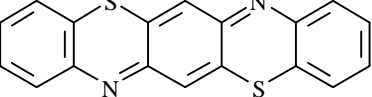
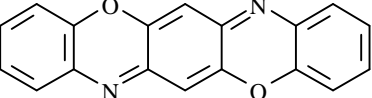
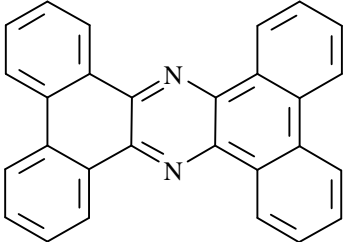
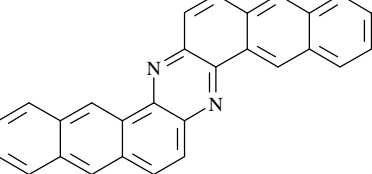
⁸ Wegen der etablierten Verwendung erhält Chinolizin den Vorrang vor Isochinolin und Chinolin.

Name	Ringanalyse	Struktur
Phthalazin	$C_4N_2-C_6$	
Naphthyridin ⁹	C_5N-C_5N	
Chinoxalin	$C_4N_2-C_6$	
Chinazolin	$C_4N_2-C_6$	
Cinnolin	$C_4N_2-C_6$	
Pteridin	$C_4N_2-C_4N_2$	
Carbazol	$C_4N-C_6-C_6$	
Phenanthridin	$C_5N-C_6-C_6$	
Acridin	$C_5N-C_6-C_6$	
Perimidin	$C_4N_2-C_6-C_6$	
Phenanthrolin ¹⁰	$C_5N-C_5N-C_6$	

⁹ Zur vollständigen Beschreibung muß die Position der Stickstoffatome angegeben werden: 1,5-; 1,6-; 1,7-; 1,8-; 2,6-; 2,7-.

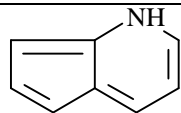
¹⁰ Zur vollständigen Beschreibung muß die Position der Stickstoffatome angegeben werden: 1,7-; 1,8-; 1,9-; 1,10-; 2,7-; 2,8-; 2,9-.

Name	Ringanalyse	Struktur
Phenazin	$C_4N_2-C_6-C_6$	
Phenomercazin	$C_4HgN-C_6-C_6$	
Phenarsazin	$C_4AsN-C_6-C_6$	
Phenophosphazin	$C_4NP-C_6-C_6$	
Phenotellurazin	$C_4NTe-C_6-C_6$	
Phenoselenazin	$C_4NSe-C_6-C_6$	
Phenothiazin	$C_4NS-C_6-C_6$	
Phenoxazin	$C_4NO-C_6-C_6$	
Thebenidin	$C_5N-C_6-C_6-C_6$	
Chindolin	$C_4N-C_5N-C_6-C_6$	
Chinindolin	$C_4N-C_5N-C_6-C_6$	
Phthaloperin	$C_4N-C_4N_2-C_6-C_6-C_6$	

Name	Ringanalyse	Struktur
Acrindolin	$C_4N-C_5N-C_6-C_6-C_6$	
Triphenodithiazin	$C_4NS-C_4NS-C_6-C_6-C_6$	
Triphenodioxazin	$C_4NO-C_4NO-C_6-C_6-C_6$	
Phenanthrazin	$C_4N_2-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	
Anthrazin	$C_4N_2-C_6-C_6-C_6-C_6-C_6$	

6.3.1.3 Triviale Heterocyclen, die nicht als Basiskomponenten verwendet werden

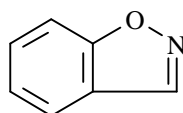
Folgendes Ringsystem wird nur als Index-Stammsystem verwendet, kann aber nicht als Basiskomponente für größere annelierte Ringsysteme herangezogen werden.

Name	Ringanalyse	Struktur
Pyrindin ¹¹	C ₅ -C ₅ N	

6.3.1.4 Die Benzo-Nomenklatur

Zweiringsysteme, in denen Benzol an einen Heterocyclus, der nach Hantzsch-Widman benannt ist, ankondensiert wurde, werden so benannt, daß die Silbe „Benz“ bzw. „Benzo“ dem Hantsch-Widman Namen vorangestellt wird. Indizierter Wasserstoff, falls notwendig, und die Position der Heteroatome wird vorangestellt. Besitzt der heterocyclische Ring einen Trivialnamen wird in gleicher Art und Weise vorgegangen, wenn nicht das neue System ebenfalls einen Trivialnamen besitzt.

Abbildung 9: Beispiele für die Benzonomenklatur

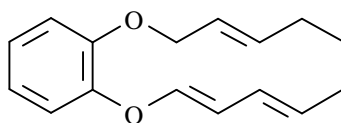


1,2-Benzisoxazol

In größeren annelierten Ringsystemen, in denen am Benzolring nur Carbocyclen ankondensiert sind, werden diese „Benzo-Namen“ nicht als Basiskomponenten verwendet.

Ist der Benzolring an einen Ring mit mehr als zehn Ringatomen anneliert, so wird die Silbe „Benz“ bzw. „Benzo“ dem „Oxa-Aza-Namen“ vorangestellt, und die Endung auf „-in“ geändert, um eine maximal mögliche Zahl an nicht kumulierten Doppelbindungen anzuzeigen. Gesättigte Kohlenstoffatome werden durch das Präfix „Hydro-“ angegeben.

Abbildung 10: Beispiel für die Benzonomenklatur bei großen Ringen



2,5,6,7-Tetrahydro-1,12-benzodioxacyclotetradecin

6.3.1.5 Nicht trivial nomenklirierte annelierte System

Eine Komponente des Ringsystems wird als Basiskomponente ausgewählt und die anderen Ringe werden daran anneliert. Die Basiskomponente kann trivial oder systematisch sein.

Ein anneliertes Ringsystem muß mindestens zwei Ringe mit 5 Ringatomen besitzen. Diese müssen nicht direkt miteinander verknüpft sein.

¹¹ Für den vollständigen Namen muß sowohl der indizierte Wasserstoff, als auch die Position des Stickstoff angegeben werden.

6.3.1.5.1 Bestimmung der Basiskomponente

Die Basiskomponente wird durch sukzessive Anwendung der folgenden Regeln bestimmt. Die Tabellen in Kapitel 6.3.1.1 und 6.3.1.2 können dabei als Hilfe verwendet werden, weil das Ringsystem, das in diesen Listen zuletzt genannt wird, höchste Priorität hat.

Die bevorzugte Basiskomponente sollte

- a) ein Heterocyclus,
- b) ein stickstoffhaltiger Heterocyclus,
- c) ein nicht stickstoffhaltiger Heterocyclus mit einem Heteroatom höchster Priorität (Kapitel 6.2.1.1) sein,
- d) die größte Zahl an Ringen,
- e) die größten Einzelringe (Benzindien anstatt Cyclopentanaphthalin ist eine Ausnahme aufgrund der gebräuchlichen Verwendung),
- f) die größte Zahl an Heteroatomen beinhalten,
- g) die größte Mannigfaltigkeit an Heteroatomen (z.B.: 1 N + 1 O ist mehr als 2 N),
- h) die größte Zahl an Heteroatomen höchster Priorität,
- i) die am ehesten lineare Anordnung (einige Ausnahmen werden gemacht, um eine größere Zahl von kleineren Fusionsvorsilben zu verwenden; z.B.: Dibenzophenanthren anstatt Naphthoanthracen),
- j) die Heteroatome mit den kleinsten Positionen besitzen.

6.3.1.5.2 Aufbau des Indexnamen

Nachdem die Basiskomponente bestimmt ist, müssen die anderen Ringe daran kondensiert werden. Um die Position der Annelierung anzugeben, müssen entsprechende Chiffren verwendet werden. Dabei geht man so vor, daß die Seiten der Basiskomponente mit lateinischen Buchstaben bezeichnet werden, und zwar beginnend mit 1,2 ist gleich a usw.. Für die annelierten Ringe werden die normalen Positionsnummern angegeben. Wenn eine Wahlmöglichkeit besteht, so sind die Chiffren möglichst klein zu wählen. Ist eine der Postionsangaben nicht notwendig, so wird sie weggelassen. Die Ziffern werden untereinander durch Beistriche und von den Buchstaben durch einen Bindestrich getrennt. Alles zusammen steht in eckiger Klammer.

Da die Annelierungskante der Basiskomponente eine Richtung besitzt, müssen für eine eindeutige Nomenklatur auch die Positionen für die daran annelierten Ringe in der selben Richtung angegeben werden.

Der Name des annelierten Ringsystems wird dann so aufgebaut, daß man zuerst die Namen der annelierten Komponenten mit der zusätzlichen Endung „-o-“, dann die Annelierungspositionen, und zum Schluß die Basiskomponente anführt.

Für folgende Ringsysteme sind verkürzte Namen zu verwenden, wenn sie als annelierte Komponente verwendet werden:

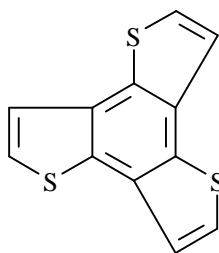
Benzol	Benzo-	Thiophen	Thieno-
Naphthalin	Naphtho-	Furan	Furo-
Acenaphthylen	Acenaphtho-	Pyridin	Pyrido-
Phenanthren	Phenanthro-	Imidazol	Imidazo-
Anthracen	Anthra-	Chinolin	Chino-
Perylen	Perylo-	Isochinolin	Isochino-

Werden Carbocyclen als Basiskomponente verwendet, so bedeutet die Verwendung des Suffix „-en“ in diesem Zusammenhang ein vollständig ungesättigtes System. Gesättigte Kohlenstoffatome werden durch das Präfix „Hydro“ gekennzeichnet.

Werden Carbocyclen ohne Trivialnamen an ein anderes Ringsystem anneliert, so wird anstatt der Endung „-en“ die Zwischensilbe „-a-“ verwendet (z.B. Cyclopenta-).

Tritt eine Basiskomponente mehr als einmal auf, so wird eine Art der multiplikativen Nomenklatur verwendet. Die zentrale Einheit wird vorangestellt, in eckiger Klammer werden die entsprechenden Chiffren angegeben, wobei für die erste Basiskomponente Buchstaben ohne, für die zweite mit einem, für die dritte mit zwei Apostroph, usw. verwendet werden, und dann wird nach der entsprechenden multiplikativen Vorsilbe (di, tri, tetra, usw.; nicht wie sonst bei der multiplikativen Nomenklatur bis, tris, tetrakis (siehe auch dort)) die Basiskomponente angegeben. Ist die Basiskomponente außer mit der zentralen Einheit noch mit anderen Ringen verknüpft, so erhält bei einer Wahlmöglichkeit die Annelierungskante mit der Zentraleinheit den kleineren Buchstaben. Die Angaben bezüglich der einzelnen Basiskomponenten werden durch Doppelpunkt getrennt.

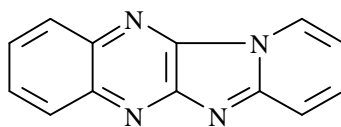
Abbildung 11: Beispiel für die multiplikative Nomenklatur bei annelierten Ringsystemen



Benzo[1,2-b:3,4-b':5,6-b'']trithiophen

Ist ein Ringsystem nicht direkt an die Basiskomponente anneliert, so wird die Kondensationsstelle mittels einfach apostrophierte Positionsnummern in diesem Ring angegeben.

Abbildung 12: Beispiel für Systeme, in denen nicht alle Ringe mit der Basiskomponente verknüpft sind



Pyrido[1',2':1,2]imidazo[4,5-b]chinoxalin

6.3.1.6 Orientierung und Nummerierung von annelierten Ringsystemen

6.3.1.6.1 Carbocyclen

Die einzelnen Ringe werden in Form von regelmäßigen Polygonen dargestellt, wobei der Dreiring nach links oder rechts, und der Fünf- bzw. Siebenring nach oben oder unten schauen kann. Das Gesamtringsystem wird nun so angeordnet, daß

- a) eine größtmögliche Zahl an Ringen in einer Reihe, und
- b) eine größtmögliche Zahl an Ringen darüber und rechts ist.

Ist eine weitere Entscheidungshilfe notwendig, so soll

- c) eine kleinstmögliche Zahl an Ringen im linken unteren Quadranten liegen

Die Nummerierung beginnt nun am rechtesten, obersten Ring an dem Atom neben der Annelierungskante, das am weitesten gegen den Uhrzeigersinn steht.

Anguläre Positionen erhalten keine neue Ziffer, sondern werden durch Hinzufügen von Buchstaben zur Ziffer des letzten nichtangulären Atoms erhalten.

Liegen mehrere Atome im Inneren eines kondensierten Ringsystems, so werden in derselben Art wie vorher die lateinischen Buchstaben a,b,c,d usw. vergeben. Dabei wird, wenn immer eine Wahlmöglichkeit besteht, ein möglichst im Uhrzeigersinn verlaufender Weg gewählt.

Ist eine weitere Entscheidungshilfe notwendig, so erhalten Kohlenstoffatome an angulären Positionen möglichst kleine Nummern.

Der indizierte Wasserstoff erhält die kleinstmögliche Position.

Folgende Carbocyclen werden speziell nummeriert: Anthracen, Phenanthren, Cyclopenta[a]phenanthren (Nummerierung wird von den Steroiden abgeleitet) und Cyclopropacyclopenta[a]phenanthren (siehe auch Kapitel 6.3.1.1)

6.3.1.6.2 Heterocyclen

Die Ringsysteme werden wie Carbocyclen angeordnet. Ist eine weitere Entscheidungshilfe notwendig, so erhalten niedrigste Positionen

- a) alle Heteroatome,
- b) das am meisten bevorzugte Heteroatom,
- c) Kohlenstoffatome in angulären Positionen,
- d) Position des indizierten Wasserstoffs, und
- e) ein anguläres vor demselben nicht angulären Heteroatom.

Das Ringsystem wird dann wie ein carbocyclisches nummeriert, mit der Ausnahme, daß Heteroatome, die zwei oder mehr Ringen angehören, ebenfalls nummeriert werden.

Folgende Heterocyclen werden speziell nummeriert: Acridin, Carbazol, Purin, Xanthen, Epoxy- und Epithiocyclopenta[a]phenanthren (Nummerierung wird von den Steroiden abgeleitet) (siehe auch Kapitel 6.3.1.2).

6.3.2 Überbrückte Ringsysteme

Bei den überbrückten Ringsystemen werden in der Nomenklatur überbrückte annelierte Ringsysteme von überbrückten Monocyclen oder Ringsystemen, die nicht als anneliert gelten, unterschieden.

6.3.2.1 Überbrückte annelierte Ringsysteme

In diesen Ringsystemen sind verschiedene Teile des annelierten Grundkörpers über eine Brücke miteinander verbunden, wobei diese Brücke keine Erweiterung des annelierten Systems darstellen darf. Zur Benennung werden entsprechende Brückenvorsilben, bei Vorhandensein mehrerer Brücken in alphabetischer Reihenfolge, vor dem Namen des annelierten Ringsystems angegeben.

Die Namen einfacher bivalenter Brücken werden aus den entsprechenden Namen der Kohlenwasserstoffe durch Hinzufügen der Endung „-o-“ erhalten; z.B. -CH₂- methano, -CH₂CH₂- ethano, -CHCH- etheno, -CH₂CH₂CH₂- propano, -CH₂CH₂CH₂CH₂- butano, -CH₂CHCHCH₂- [2]-buteno, -C₆H₄- benzeno, usw.. Trivalente Brücken heißen u.a.; -CH= metheno, -CH₂CH= ethanyliden, -CH₂CHCH= 1-propan-3-yliden, usw.. Tetravalente Brücken werden ähnlich behandelt.

Die Positionen im annelierten Ringsystem, an denen die Brücke angreift, werden nach den Regeln für freie Valenzen von Radikalen angegeben (möglichst klein).

Brücken, die von monocyclischen Carbocyclen außer Benzol abgeleitet sind, werden so bezeichnet wie bei der Annelierung, nur wird die Vorsilbe „endo-“ zusätzlich verwendet; z.B.: „endo-cyclopenta“.

Einfache heterocyclische Brücken werden u.a. wie folgt bezeichnet; -O- epoxy, -S- epithio, -NH- imino, -OO- epidioxy, -SiH₂- silano, usw..

Heterocyclische Ringe können ebenfalls als Brücken formuliert werden; z.B. [3,4]-furano, usw..

Werden innerhalb der Brücke Positionsangaben gemacht, so müssen diese in eckiger Klammer angegeben werden.

Brücken, die aus mehreren Einheiten aufgebaut sind, werden durch Kombination der Namen für die Einzelkomponenten erzeugt; z.B. -NHCH₂CH₂- iminoethano, -OSO- epoxythioxy, -C₆H₆O- epoxy[1,2]benzeno, usw..

Der indizierte Wasserstoff des annelierten Systems wird, soweit das möglich ist, so angegeben, daß er die Einführung der Brücke ermöglicht. Andernfalls erhält er die kleinstmögliche nicht anguläre Position und vor den Positionsziffern der Brücke wird ein weiterer indizierter Wasserstoff angegeben.

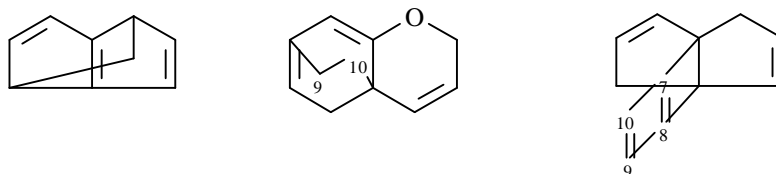
Nummeriert werden die Systeme so, daß zuerst die Regeln zur Bezifferung des annelierten Systems einzuhalten sind, wobei, soweit das möglich ist, Brückenkopfatome möglichst kleine Ziffern erhalten sollen. Die Brückenatome selbst werden beginnend bei dem Brückenkopfatom mit der höheren Nummer fortlaufend gezählt. In cyclischen Brücken wird zuerst die kürzere Strecke beziffert und der Rest des Ringes in derselben Richtung weiternumeriert. Heteroatome erhalten unter Einhaltung der vorher genannten Regeln möglichst kleine Positionen.

Die Festlegung der Brücke erfolgt nach Anwendung folgender Kriterien auf das nicht überbrückten annelierte Stammsystem:

- Es soll möglichst viele Ringe besitzen.
- Es soll die größte Zahl an Ringatomen besitzen.
- Die Ringe sollen möglichst linear angeordnet sein.
- Es soll das am meisten bevorzugte annelierte Ringsystem sein.

Besteht bei einem annelierten Ringsystem die Möglichkeit verschiedene Brücken aufzubauen, so werden zwei einfach Brücken einer zusammengesetzten und eine gesättigte einer ungesättigten vorgezogen.

Abbildung 13: Beispiele für überbrückte annelierte Ringsysteme



1,4-Dihydro-1,4-methanopentalen
 5*H*-4*a*,7-Ethano-2*H*-1-benzopyran
 1*H*,4*H*-3*a*,6*a*-[1,2]-endo-Cyclobutapentalen

6.3.2.2 Alle anderen überbrückten Ringsysteme

Alle anderen überbrückten Ringsysteme werden nach der „von Baeyer Nomenklatur“ benannt. Diese wurde ursprünglich für Kohlenwasserstoffe entwickelt, die aus zwei Ringen bestanden, aber nicht wie ein anneliertes bzw. überbrücktes anneliertes Ringsystem behandelt werden konnten.

Man geht bei diesem Nomenklaturtyp so vor, daß dem Namen des acyclischen Kohlenwasserstoffs mit derselben Zahl an Kohlenstoffatomen ein Terminus für die Zahl der Ringe (Bicyclo-, Tricyclo-, Tetracyclo-, usw.) und ein Satz von Zahlen, die durch Punkte getrennt und in eckiger Klammer geschrieben werden, vorangestellt wird. Die Zahlen in der eckigen Klammer beschreiben in absteigender Reihenfolge die Zahl der Atome zwischen den beiden Brückenköpfen. Numeriert wird dieser Typ von Ringsystem so, daß ein Brückenkopf die Position „1“ erhält und man entlang der längsten Kette zum anderen Brückenkopf geht, von dort über die zweitlängste Kette zurück und dann den dritten Arm numeriert, und zwar im Gegensatz zu den überbrückten annelierten Systemen, beim kleineren Brückenkopfatom beginnend. Die Nebenbrücken werden in fallender Reihenfolge, bezogen auf die Zahl der Brückenelemente, beginnend beim Brückenkopf mit der höheren Nummer beziffert.

Der Terminus „Bicyclo-“ gibt an, daß ein System aus zwei Ringen besteht. Da dies nicht immer gleich einsichtig ist, v.a. bei Mehr Ringsystemen, sei hier eine einfache Möglichkeit angegeben, um die Zahl der Ringe, und damit die zu verwendende Vorsilbe zu bestimmen.

Man bestimmt die Zahl der Bindungen, die mindestens geöffnet werden müssen, um ein offenkettiges Gerüst zu erhalten. Diese Zahl entspricht der Zahl der Ringe und liefert somit den zu verwendenden Terminus.

Ab Tricyclo-Verbindungen liegen neben der Hauptbrücke auch Nebenbrücken vor. Die Verknüpfungspositionen dieser Nebenbrücken mit dem Hauptgerüst werden hochgestellt hinter der Zahl der Kohlenstoffatome dieser Brücke angegeben.

Abbildung 14: Beispiele für die „von Baeyer Nomenklatur“



Bicyclo[5.3.2]dodecan

Tricyclo[5.3.1.1^{2,6}]dodecan

Ist mehr als ein „von Baeyer Name“ möglich, so werden folgende Regeln angewendet bis eine Entscheidung gefällt werden kann.

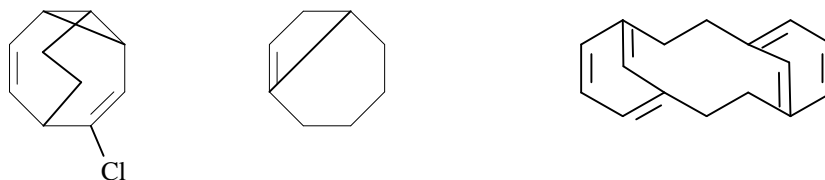
- Der Hauptring besteht aus möglichst vielen Atomen, wobei zwei dieser Atome die Brückenköpfe für die Hauptbrücke sein müssen.
- Die Hauptbrücke ist so groß als möglich.
- Der Hauptring wird durch die Hauptbrücke so symmetrisch als möglich geteilt.
- Die Positionen der Brückenköpfe der Nebenbrücken sollen so klein als möglich sein, unabhängig von der Reihenfolge in der sie genannt werden.

Nicht vollständig gesättigte Atome werden durch die Endungen „-en“ und „-in“ gekennzeichnet. Die Position wird wie üblich durch die Nummer des ersten Atoms der Doppel- oder Dreifachbindung angegeben. Beginnt eine Doppelbindung an einem Brückenkopfatom und ist das zweite Atom nicht das mit der nächsthöheren Nummer, wird die Nummer dieses Atoms zusätzlich in Klammer angegeben.

Besteht eine Wahlmöglichkeit, so werden Positionen für Doppelbindungen so gewählt, daß

- Die Numerierung erfolgt im Uhrzeigersinn.
- Die Fälle, in denen beide Positionen der Doppelbindung angegeben werden müssen, werden minimiert.
- Kleinstmögliche Positionen werden angegeben.

Abbildung 15: Doppelbindungen bei „von Baeyer Namen“



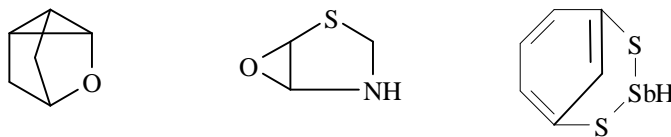
4-Chlortricyclo[3.3.2.0^{2,8}]deca-3,6-dien

Bicyclo[4.2.0]oct-6-en

Tricyclo[9.3.1.1^{4,8}]hexadeca-1(15),4,6,8(16),11,13-hexaen

Heterocyclische Systeme werden in der „von Baeyer Nomenklatur“ so benannt, daß den Namen der entsprechenden Kohlenwasserstoffe, die Ersatzsilben (oxa, thia, aza usw.) vorangestellt werden. Die Heteroatome erhalten gemäß ihrer Präferenz (siehe Kapitel 6.2.1.1) möglichst kleine Ziffern. Doppel- und Dreifachbindungen werden wie bei Kohlenwasserstoffen behandelt.

Abbildung 16: Heterocyclen mit „von Baeyer Namen“

3-Oxatricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptan

6-Oxa-2-thia-4-azabicyclo[3.1.0]hexan

2,4-Dithia-3-stibabicyclo[3.3.1]nona-1(9),5,7-trien

Gesättigte überbrückte Ringsysteme, die nur aus Silicium bzw. Silicium alternierend mit Stickstoff oder einem Chalcogen aufgebaut sind, werden so bezeichnet, daß dem Namen der acyclischen Verbindung mit derselben Anzahl an Siliciumatomen die Silbe „Bicyclo-“, „Tricyclo-“ usw. und die in eckige Klammer gestellte Zahl der Atome zwischen den Brückenköpfen vorangestellt wird.

6.3.3 Spiroverbindungen

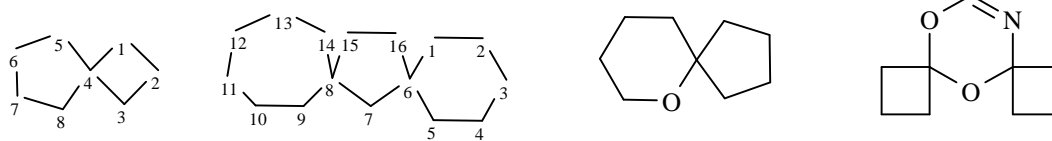
In Spiro-Systemen sind zwei Ringe bzw. Ringsysteme über ein gemeinsames Atom („Spiro-Zentrum“) miteinander verknüpft. Für die einfachsten Monospiro-Systeme, in denen zwei Alicyclen miteinander verknüpft sind, erhält man den Namen so, daß man dem Namen des offenkettigen Kohlenwasserstoffs mit derselben Zahl an Kohlenstoffatomen die Silbe „Spiro-“ und in eckiger Klammer in aufsteigender Reihenfolge die Zahl der Atome angibt, die in den einzelnen Ringen mit dem „Spiro-Zentrum“ verknüpft sind. Die Numerierung erfolgt neben dem „Spiro-Zentrum“ im kleineren Ring, durchläuft den kleineren Ring, das „Spiro-Zentrum“ und den größeren Ring.

Das System wird auf „Dispiro-“, „Trispiro-“, usw. Systeme ausgedehnt, indem man in einem endständigen Ring neben dem „Spiro-Zentrum“ beginnt, und zwar so, daß die „Spiro-Zentren“ möglichst kleine Nummern bekommen.

Heterocyclische Spirosysteme werden so benannt, daß den Namen der entsprechenden Kohlenwasserstoffe, die Ersatzsilben (oxa, thia, aza usw.) vorangestellt werden. Die Heteroatome erhalten gemäß ihrer Präferenz (siehe Kapitel 6.2.1.1) möglichst kleine Ziffern.

Doppel- und Dreifachbindungen werden durch die Endsilben „-en“ bzw. „-in“ ausgedrückt.

Abbildung 17: Beispiele für Spiroverbindungen



Spiro[3.4]octan

Dispiro[5.1.6.2]hexadecan

6-Oxaspiro[4.5]decan

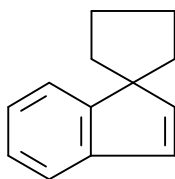
5,10-Dioxa-12-azadispiro[3.1.3.3]duodec-11-en

Gesättigte Spirosysteme, die nur aus Silicium bzw. Silicium alternierend mit Stickstoff oder einem Chalcogen aufgebaut sind, werden so bezeichnet, daß dem Namen der acyclischen Verbindung mit derselben Anzahl an Siliciumatomen die Silbe „Spiro-“, „Dispiro-“ usw. und die in eckige Klammer gestellte Zahl der Atome zwischen den Spirozentren vorangestellt wird.

Monospirosysteme, die zumindest aus einem annelierten oder überbrückten System bestehen, werden so benannt, daß die Namen der einzelnen Komponenten in alphabetischer Reihenfolge in eckige Klammer gestellt werden, und die Silben „Spiro“, „Dispiro“, usw. vorangestellt werden. Die Position des „Spiro-Atoms“ wird durch zwei Zahlen angegeben, die durch Beistrich getrennt sind, und sich auf die zwei Komponenten beziehen. Die Position, die sich auf die zweite Komponente bezieht, wird durch ein Apostroph gekennzeichnet. Indizierter Wasserstoff (siehe auch dort) wird soweit möglich dazu verwendet, „Spiro-Zentren“ unterzubringen.

Positionen, die sich auf die jeweilige Komponente, nicht aber auf das Gesamtsystem beziehen, werden in eckiger Klammer angegeben.

Abbildung 18: Beispiele für eine Spiroverbindungen, die ein anneliertes Ringsystem beinhaltet

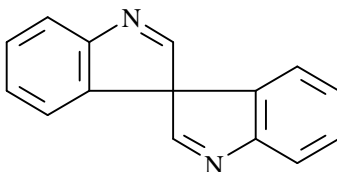


Spiro[cyclopentan-1,1'-[1H]inden]

Addierter Wasserstoff (siehe auch dort) wird in der üblichen Weise in Klammer angegeben, allerdings wird ein Apostroph verwendet, wenn er sich nicht auf die erste Komponente bezieht. Die kleinstmögliche Position wird verwendet, wenn nicht eine andere für eine funktionelle Gruppe höchster Priorität verwendet werden kann.

Monospirosysteme, die aus zwei identischen annelierten Komponenten aufgebaut sind, erhalten „Spirobi“-Namen. Der Name der Komponente wird in eckiger Klammer geschrieben, wenn Positionsangaben vor dem Namen stehen, oder wenn der Name selbst erst aus mehreren Untereinheiten aufgebaut ist. Die Position des „Spiro-Zentrums“ wird vor der Silbe „Spirobi-“ angegeben, und addierter Wasserstoff wird gegebenenfalls in Klammer im Anschluß an diese Positionen angegeben.

Abbildung 19: Beispiele für eine Spirobiverbindungen

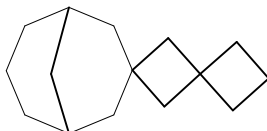


3,3'-Spirobi[3H-indol]

Di-, Tri-, usw. Spiro-Systemen, die zumindest ein anneliertes oder überbrücktes Ringsystem beinhalten, werden nach Erweiterung dieser Regeln benannt. Sind die endständigen Komponenten identisch, ist die frühere Indexposition des gesamten Namen entscheidend. Die Ringe werden der Reihe nach mit einem, zwei, drei usw. Apostroph gekennzeichnet.

Verzweigte Polyspiro-Systeme, in denen ein Ring von mehreren identischen Einheiten umgeben ist, werden so benannt, daß die zentrale Einheit zuerst genannt wird, und den identischen Komponenten eine multiplikative Silbe vorangestellt wird. Wenn zwei Komponenten eines verzweigten Polyspiro-Systems identisch und eine verschieden ist, werden alle in alphabetischer Reihenfolge angeführt, und die Silbe „bis-“ wird der doppelt vorkommenden Komponente vorangestellt.

Abbildung 20: Beispiele für eine Dispiroverbindungen, die ein überbrücktes Ringsystem beinhaltet



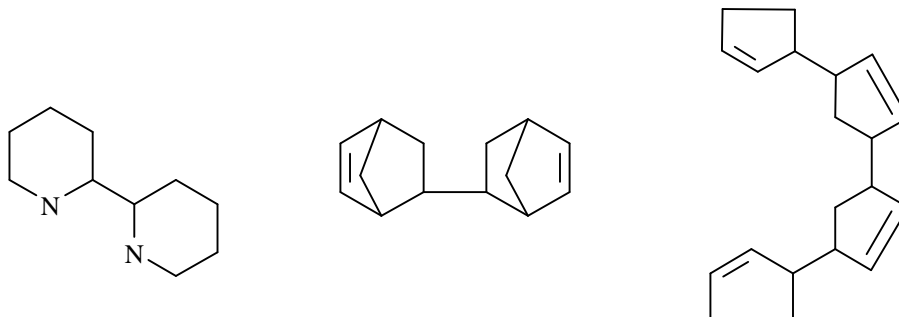
Dispiro[bicyclo[3.3.1]nonan-3,1'-cyclobutan-3',1''-cyclobutan]

6.3.4 Ringverbände

Sind mehrere gleiche Ringsysteme über Einfachbindungen nicht notwendigerweise an derselben Position miteinander verknüpft, so spricht man von Ringverbänden. Sie dienen als Stammsysteme für die substitutive Nomenklatur und befinden sich prioritätsmäßig gerade über dem Einzelring des jeweiligen Verbands. Mit Ausnahme der Verbände, die aus Benzol, und Zweiringverbänden, die aus Cycloalkanen, Cycloalkenen oder Heterosystemen mit „Cyclo“-Namen bestehen, werden sie so benannt, daß dem Namen des Einzelrings

entsprechend der Zahl der Ringe eine der folgenden Silben vorangestellt wird: Bi-, Ter-, Quater-, Quinque-, Sexi-, Septi-, Octi-, Novi-, Deci-, Undeci-, usw.. Positionen vor dem Namen geben die jeweiligen Verknüpfungsstellen an. Diese sind so klein als möglich, müssen aber mit der üblichen Numerierung des Einzelrings in Einklang stehen.

Abbildung 21: Beispiele für Ringverbände



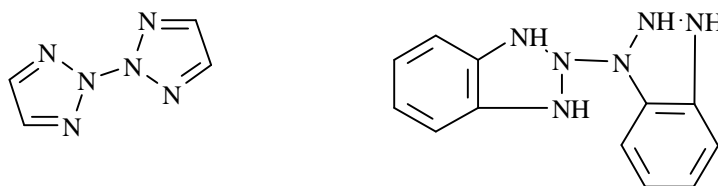
2,2'-Bipiperidin

5,5'-Bibicyclo[2.2.1]hept-2-en

3,3':5',3'':5'',3''':5'''-Quatercyclopenten

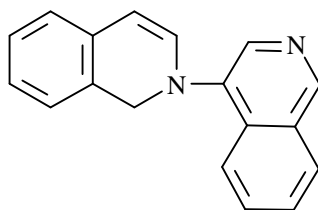
Wenn es möglich ist, wird der indizierte Wasserstoff an die Stelle der Verknüpfung gesetzt. Ist die Position des indizierten Wasserstoffs nicht in allen Ringen gleich, wird kein Ringverbund-Name verwendet.

Abbildung 22: Beispiele für indizierten Wasserstoff in einem Ringverbund

2,2'-Bi-2*H*-1,2,3-triazol1-(1,3-Dihydro-2*H*-benzotriazol-2-yl)-1,2-dihydro-1*H*-benzotriazol

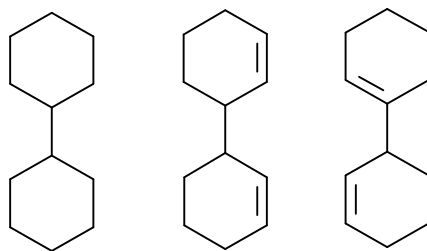
Addierter Wasserstoff wird direkt hinter der Position angegeben, auf die er sich bezieht.

Abbildung 23: Beispiel für addierten Wasserstoff in einem Ringverband

2(1*H*),4'-Biisochinolin

Lineare Anordnungen von Benzolringen werden so bezeichnet, daß die entsprechende multiplikative Vorsilbe vor „-phenyl“ genannt wird. Die Verknüpfungsstellen werden davor in der üblichen Weise angegeben und entsprechend indiziert. Zweikomponentensysteme, die aus monocyclischen Kohlenwasserstoffen oder aus Heterosystemen mit „Cyclo“-Namen (z.B. Cyclopentastannan) bestehen, werden auf Basis der entsprechenden Radikale benannt. Die Position der Verknüpfung wird nur dann angegeben, wenn das Radikal nicht von sich aus schon eine Position hat. Sind zwei ungesättigte Carbocyclen über eine Einfachbindung miteinander verknüpft, so werden sie nur dann als Ringverband nomenklirt, wenn die Doppelbindungen bezüglich der Ringverknüpfungsstelle symmetrisch sind.

Abbildung 24: Beispiele Ringverbände aus zwei Carbocyclen

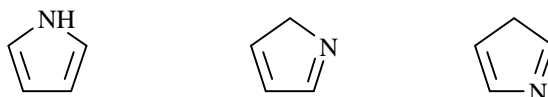


1,1'-Bicyclohexyl
 Bi-2-cyclohexen-1-yl
 1-(2-Cyclohexen-1-yl)cyclohexen

6.4 Der indizierte Wasserstoff

Der indizierte Wasserstoff wird durch eine Position und ein kursiv geschriebenes „H“ vor einem Ringsystem angegeben und dient dazu, die Position(en) zu beschreiben, die gesättigt sein müssen um ein definiertes, stabiles Ringsystem zu erhalten.

Abbildung 25: Der indizierte Wasserstoff am Beispiel Pyrrol

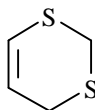


1*H*-Pyrrol
 2*H*-Pyrrol
 3*H*-Pyrrol

Ist ein Ringsystem partiell gesättigt, so wird von der möglichst ungesättigten Verbindung ausgegangen, und wenn in dieser die Angabe eines indizierten Wasserstoffs notwendig ist, dieser auch im partiell hydrierten System angegeben, und zwar an der kleinstmöglichen Position, die mit der vorgegebenen Struktur in Einklang steht.

Der indizierte Wasserstoff wird nicht angegeben, wenn er an einer Position zwischen zwei bivalenten Heteroatomen steht.

Abbildung 26: Beispiel für den Wasserstoff zwischen zwei bivalenten Heteroatomen



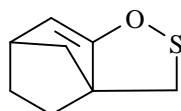
4*H*-1,3-Dithiin

In annelierten Systemen wird die kleinstmögliche, nicht anguläre Position für den indizierten Wasserstoff verwendet.

Der indizierte Wasserstoff wird für anguläre oder nicht anguläre Positionen vergeben, wenn er dazu dient Struktur-Elemente wie Brücken, Spiro-Zentren oder Ring-Verbindungsstellen zu ermöglichen, und das entsprechende Ringsystem auch aufgezeichnet werden kann.

Wenn das Hinzufügen einer Brücke es notwendig macht, daß Wasserstoff addiert wird, der indizierte Wasserstoff aber nicht verwendet werden kann, weil das entsprechende Ringsystem nicht dargestellt werden kann, so wird die niedrigste Position für den indizierten Wasserstoff des Ringsystems vergeben und ein weiterer indizierter Wasserstoff vor der Brücke angeführt.

Abbildung 27: Beispiel für einen zusätzlichen indizierten Wasserstoff bei Brücken

5,6-Dihydro-4*H*-3a,6-methano-3*H*-1,2-benzoxathiol

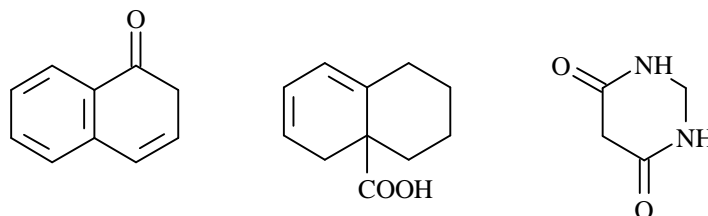
Wurden alle Strukturbedingungen berücksichtigt, so wird die Position des indizierten Wasserstoffs weiters so gewählt, daß die Unterbringung einer funktionellen Gruppe, bzw. in cyclischen Radicalen, der freien Radikalstelle ermöglicht wird. Dies geschieht so lange, bis die Zahl der funktionellen Gruppen größer wird, als die Zahl der zu nennenden indizierten Wasserstoffe. Für normale Ringsysteme mit einem indiziertem Wasserstoff ist dies bereits bei zwei funktionellen Gruppen höchster Priorität der Fall. Unter diesen Bedingungen wird die Position des indizierten Wasserstoffs so klein als möglich, nicht angular gewählt, unabhängig von den Positionen der funktionellen Gruppen. (Funktionelle Gruppen auf Brücken werden bei dieser Regel nicht berücksichtigt.)

6.5 Der addierte Wasserstoff

Der addierte Wasserstoff wird in gleicher Weise wie der indizierte Wasserstoff zur Unterbringung von strukturellen Eigenschaften eines Ringsystems oder von funktionellen Gruppen höchster Priorität verwendet, allerdings nur dann, wenn das ursprüngliche Ringsystem keinen indizierten Wasserstoff besitzt, oder dieser die Unterbringung der obgenannten Dinge nicht ermöglicht.

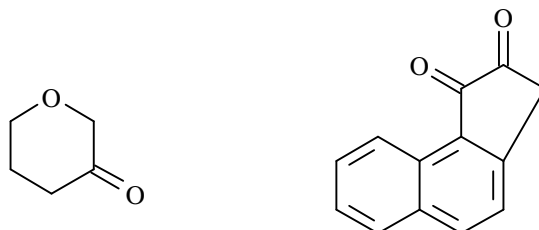
Der addierte Wasserstoff wird in Form einer Position und eines kursiv geschriebenen „H“, beides in Klammer, angegeben, und zwar direkt hinter der Position, die das Strukturmerkmal oder die die funktionelle Gruppe höchster Priorität beschreibt, für deren Unterbringung er notwendig ist.

Abbildung 28: Beispiele für einen addierten Wasserstoff

1(2*H*)-Naphthalinon1,3,4,5-Tetrahydro-4a(2*H*)-naphthalincarbonsäure2,3-Dihydro-4,6(1*H*,5*H*)-pyrimidindion

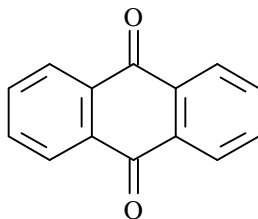
Ist der addierte Wasserstoff zur Unterbringung einer funktionellen Gruppe höchster Priorität bzw. einer Radikalstelle notwendig, so erhält er die kleinstmögliche angular oder nicht angular Position. Besitzt ein Ringsystem bereits einen indizierten Wasserstoff, der aber nicht zur Unterbringung dieser Funktionen verwendet werden kann, so erhält dieser die kleinstmögliche Position vor dem addierten Wasserstoff.

Abbildung 29: Beispiele für Ringsysteme mit indiziertem und addiertem Wasserstoff

Dihydro-2*H*-pyran-3(4*H*)-on1*H*-Benz[e]inden-1,2(3*H*)-dion

Besitzt eine Verbindung zwei funktionelle Gruppen höchster Priorität (z.B. -dion), so wird der addierte Wasserstoff nur dann angegeben, wenn er notwendig ist; d.h., daß nur so viele Wasserstoffe addiert wurden, wie zur Unterbringung dieser Gruppen notwendig sind.

Abbildung 30: Beispiel für ein partiell hydriertes Ringsystem ohne addierten Wasserstoff



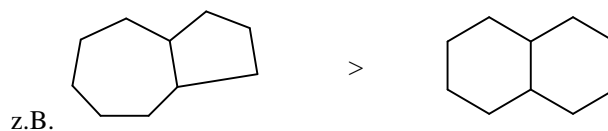
9,10-Anthracendion

Ist der addierte Wasserstoff auch noch zur Unterbringung von Spirozentren bzw. Ringverbänden notwendig, so wird er in abfallender Priorität zuerst für die Spiro- oder Ringverbund-Bindungsstelle, dann für die funktionelle Gruppe höchster Priorität, und zuletzt für die kleinstmögliche Position verwendet.

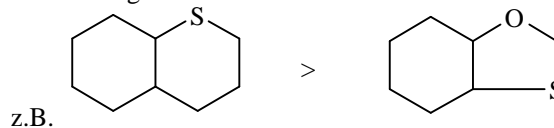
6.6 Auswahl des bevorzugten Ringsystems als Stammsystem

Wenn eine Entscheidung getroffen werden muß, welches Ringsystem als Stammsystem zu verwenden ist, geht man nach den folgenden Kriterien vor:

- Es muß Stickstoff beinhalten (z.B. Pyridin $>^{12}$ Furan oder Benzol).
- Es muß ein Heterocyclus sein (z.B. Furan $>$ Benzol).
- Es muß die größere Zahl an Ringen besitzen (z.B. Chinolin $>$ Pyridin).
- Es muß möglichst weit oben in folgender Liste stehen:
 - Spiro-System
 - Überbrücktes anneliertes Ringsystem
 - Überbrücktes Ringsystem
 - Anneliertes Ringsystem
- Für annelierte Systeme muß gelten, daß sie den größeren Einzelring besitzen.



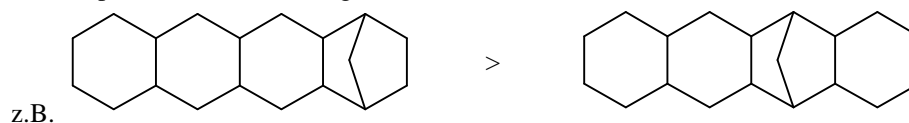
- Es muß die größere Zahl an Ringatomen besitzen.



- Für überbrückte, nicht annelierte Ringsysteme muß gelten, daß die Zahl der Atome, die zwei oder mehr Ringen gemeinsam sind, am größten ist.

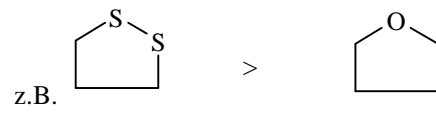


- Die Brückenpositionen müssen möglichst klein sein.

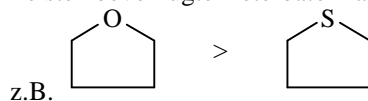


- Das Ringsystem muß die größere Zahl an Heteroatomen beinhalten

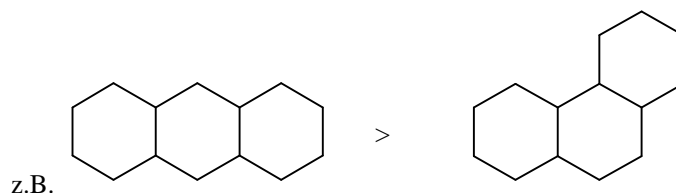
¹² $>$ bedeutet in diesem Zusammenhang höhere Priorität als.



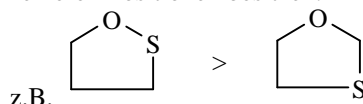
- j) Das Ringsystem muß das am meisten bevorzugte Heteroatom außer Stickstoff beinhalten.



- k) Die Ringe müssen möglichst linear angeordnet sein.

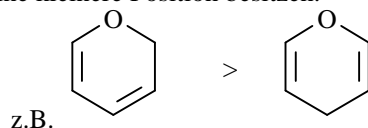


- l) Die Heteroatome müssen die kleineren Positionen besitzen.



- m) Das Ringsystem muß vom Namen her einen geringeren Zustand der Sättigung aufweisen (z.B. Pyridin > Piperidin).

- n) Der indizierte Wasser muß eine kleinere Position besitzen.

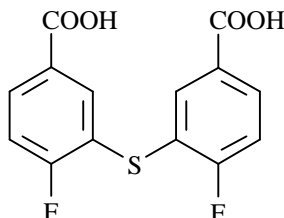


- o) Das Ringsystem muß die frühere Indexposition aufweisen.

6.7 Die multiplikative Nomenklatur

Tritt in einem Molekül ein Stammsystem, identisch substituiert und modifiziert, mehrmals auf, und sind diese nur durch ein Atom oder eine Gruppe von Atomen getrennt, so ist, falls kein anderes Entscheidungskriterium davor zutrifft, die multiplikative Nomenklatur anzuwenden.

Abbildung 31: Beispiel für ein multiplikativ zu benennendes Molekül



3,3'-Thiobis[4-fluorbenzoesäure]

Der Name wird so aufgebaut, daß zuerst die Verknüpfungsstellen am Stammsystem (das erste System normal, das zweite mit einem Apostroph, usw.), dann das zentrale Radikal, wenn notwendig in Klammer, dann die entsprechende multiplikative Silbe (z.B. bis, tris, usw.), und zum Schluß in eckiger Klammer das entsprechend substituierte und modifizierte Stammsystem angegeben wird.

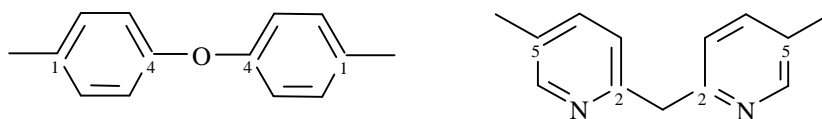
Die einfachsten zentralen Radikale sind Atome oder Radikale, die mehrere Bindungsstellen aufweisen. Die Radikale können auch substituiert sein. Beispiele dafür sind:

-O-	oxy	CH ₃ -(CH)-	ethyliden
-S-	thio	-C ₆ H ₄ -	phenylen (z.B. 1,4-)
-CH ₂ -	methylen	-CHCl-CH ₂ -	1-chlor-1,2-ethandiyl
-(N)-	nitrilo	-NCH ₃ -	methylimino

Die zentralen Einheiten können durch Verknüpfung von verschiedenen Einzelradikalen entstanden sein, allerdings müssen alle weiter außen liegenden Radikale völlig symmetrisch sein.

Multivalente Radikale, die nicht die zentrale Einheit sind, werden, wenn es keiner anderen Regel widerspricht, so nummeriert, daß die Verbindungsstelle mit dem Stammsystem eine möglichst kleine Nummer erhält.

Abbildung 32: Beispiele für die Nummerierung in zusammengesetzten multivalenten Radikale

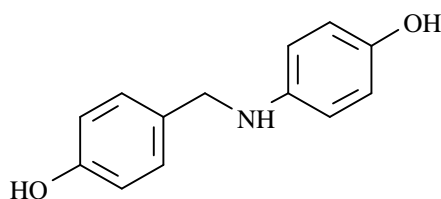


(oxydi-4,1-phenylen)

(methylendi-2,5-pyridindiyl)

Die multiplikative Nomenklatur darf nicht angewendet werden, wenn die Zentraleinheit aus mehreren multivalenten Radikalen besteht, die aber nicht absolut symmetrisch sind. In solchen Fällen entscheidet dann die frühere Indexposition des gesamten Namens.

Abbildung 33: Ein Beispiel, in dem die Verwendung der multiplikativen Nomenklatur untersagt ist



4-[[4-(4-Hydroxyphenyl)amino]methyl]phenol und nicht 4-[[4-(4-Hydroxyphenyl)methyl]amino]phenol

7 Modifizierte funktionelle Gruppen

Einige Verbindungsklassen werden, weil sie als nahe verwandte Derivate von anderen funktionellen Gruppen betrachtet werden können, auch innerhalb der Nomenklatur als Modifikationen behandelt.

Dazu gehören als Modifikation

von Säuren:

Anhydride, Ester¹³, Hydrazide

von Alkoholen:

Ester¹³

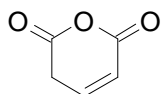
von Aldehyden und Ketonen:

Hydrazone, Oxime

Die modifizierten funktionellen Gruppen werden bezüglich ihrer Reihung als funktionelle Gruppe höchster Priorität gleich behandelt wie die nicht modifizierten Verbindungen. Ist die modifizierte Gruppe nicht funktionelle Gruppe höchster Priorität, so wird sie wie ein normaler Substituent behandelt.

Cyclische Modifikationen werden immer als entsprechende Heterocyclen nomenkliziert. Andere, als die oben genannten, Derivate (z.B. Acetale, Ketale, Semicarbazone, Lactone, usw.) werden nie als Modifikationen benannt.

Abbildung 34: Beispiel für ein cyclisches Anhydrid



2H-Pyran-2,6(3H)-dion

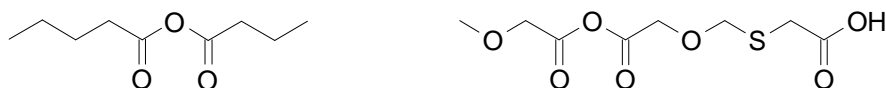
¹³ Ein Ester kann sowohl als Modifikation der Säure als auch des Alkohols betrachtet werden. Wann er in Bezug auf die Namensgebung wie zu behandeln ist, wird in Kapitel 7.2. dargelegt.

7.1 Anhydride

Der Name wird gebildet, indem der Name der Säure höherer Priorität genannt wird, gefolgt von „Anhydrid mit“ und dem Namen der Säure niedriger Priorität.

Ist das Anhydrid in einem heteroacyclischen System eingebaut, so ist unter den im Kapitel 9 genannten Voraussetzungen manchmal, die „Oxa-Aza-Nomenklatur“ anzuwenden. Die Regel in bezug auf die funktionelle Gruppe höchster Priorität darf dabei aber keinesfalls verletzt werden.

Abbildung 35: Beispiele für acyclische Anhydride



Pentansäure, Anhydrid mit Butansäure

4,6-Dioxo-2,5,8-trioxa-10-thia-duodecan-12-säure

7.2 Ester

Wie schon in der Einleitung zu den modifizierten funktionellen Gruppen angedeutet ist, können Ester im nomenklatorischen Zusammenhang sowohl als Derivate der Säure als auch des Alkohols aufgefaßt werden. Dies ist insbesondere deshalb interessant, weil Alkohole bezüglich ihrer Priorität als funktionelle Gruppe unterhalb der Säuren eingestuft sind.

Der Grund für diese Anomalie liegt darin, daß man bei Estern einfacher Säuren („Klasse 1“-Säuren) mit „nicht einfachen“ Alkoholen („Klasse 2“-Alkoholen) davon ausgeht, daß der Alkohol der interessantere Teil des Esters ist, und deshalb den Namen des Esters auf Basis des Alkohols aufbaut.

Ist der Alkohol des Esters ebenfalls „einfach“ („Klasse 1“-Alkohol) so wird der Ester wieder als Modifikation der Säure betrachtet.

Damit ergibt sich zusammenfassend, daß nur im Fall „Klasse 1“-Säure plus „Klasse 2“-Alkohol der Name des Esters aufbauend auf der Alkoholkomponente angegeben wird.

Säure	Alkohol	Name basiert auf
Klasse 1	Klasse 1	Säure
Klasse 1	Klasse 2	Alkohol
Klasse 2	Klasse 1	Säure
Klasse 2	Klasse 2	Säure

Die folgenden Tabellen geben explizit die Säuren und Alkohole der Klasse 1 an. Alle nicht angeführten Verbindungen, insbesondere isotopenmarkierte Derivate der Klasse 1, gehören der Klasse 2 an.

Säuren:

Essigsäure (Acetat), Benzolsulfonsäure (Benzolsulfonat), 4-Methylbenzolsulfonsäure, Benzoesäure (Benzoat) und die Monoamino-, Mononitro-, und Dinitro-Derivate, Borsäure (Borat), Carbaminsäure (Carbamat), Methylcarbaminsäure, Phenylcarbaminsäure, Kohlensäure (Carbonat), Ameisensäure (Formiat), Methansulfonsäure, Salpetersäure (Nitrat), Phosphorsäure (Phosphat), Dithiophosphorsäure, Thiophosphorsäure, Phosphorige Säure (Phosphit), Propansäure (Propionat), Schwefelsäure (Sulfat), Schwefelige Säure (Sulfit).

Alkohole:

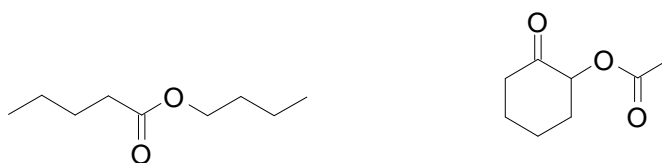
Benzolethanol, Benzolmethanol, 1-Butanol, 2-Ethyl-1-butanol, 2-Butanol, Cyclohexanol, 1-Decanol, 1-Dodecanol, Ethanol, 2-(Diethylamino)ethanol, 2-(Dimethylamino)ethanol, Ethenol, 1-Heptanol, 1-Hexanol, 2-Ethyl-1-hexanol, Methanol, 1-Nonanol, 1-Octadecanol, 1-Octanol, 1-Pentanol, Phenol und die Monochlor-, monomethyl-, und Mononitro-Derivate, 1-Propanol, 2-Methyl-1-propanol, 2-Propanol, 2-Methyl-2-propanol, 2-Propen-1-ol.

Thiole:

Die Liste der Thiole entspricht der der Alkohole (z.B.: Benzolethanthiol, 2-Methyl-2-propanthiol), nur wird die dem Phenol analoge Verbindung als Benzolthiol bezeichnet.

Ist ein Ester aus einer Säure der Klasse 1 und einem Alkohol der Klasse 2 aufgebaut, und treten im Alkoholteil funktionelle Gruppen auf, die von ihrer Priorität über dem Alkohol einzustufen sind, so werden diese zur funktionellen Gruppe höchster Priorität und der Ester wird nur mehr als Substituent betrachtet.

Abbildung 36: Beispiele für Ester

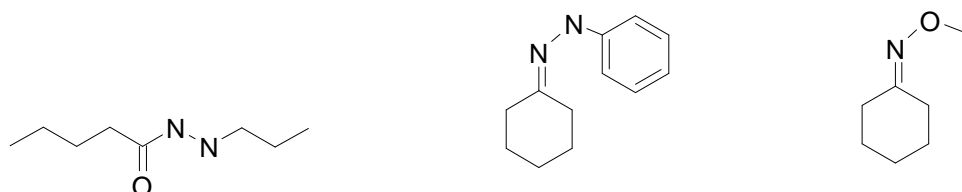


Pentansäure, butylester
2-(Acetyloxy)cyclohexanon

7.3 Hydrazide, Hydrazone und Oxime

Für alle drei Verbindungsklassen wird so vorgegangen, daß der Name der entsprechenden Stammverbindung (Säure, Keton, bzw. Aldehyd) vorangestellt wird, gefolgt von der Modifikationsangabe Hydrazid, Hydrazone, bzw. Oxim.

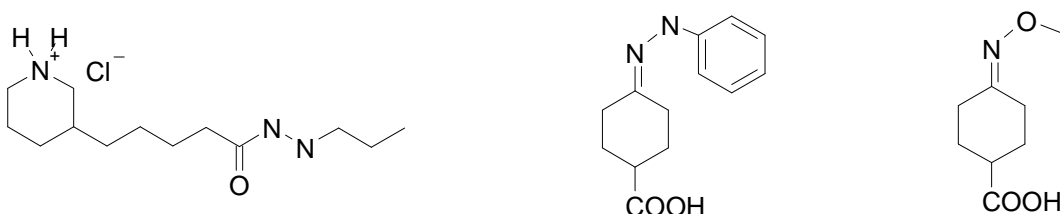
Abbildung 37: Beispiele für Hydrazide, Hydrazone und Oxime



Pentansäure, 2-propylhydrazid
Cyclohexanon, 2-phenylhydrazone
Cyclohexanon, O-methyloxim

Ist die modifizierte Gruppe nicht funktionelle Gruppe höchster Priorität, so wird sie insgesamt als Substituent angegeben. In Substituenten gibt es keine Modifikationen.

Abbildung 38: Beispiele für Hydrazide, Hydrazone und Oxime, in denen neben diesen Gruppen noch höherwertige Funktionalitäten auftreten



3-[5-Oxo-5-(2-propylhydrazino)pentyl]piperidiniumchlorid
4-(Phenylhydrazono)cyclohexancarbonsäure

4-(Methoxyimino)cyclohexancarbonsäure

8 Stereochemische Descriptoren

Die Angabe der Stereochemie erfolgt innerhalb der CA's nach drei Methoden:

- Stereochemie von systematisch benannten Verbindungen wird ebenfalls systematisch in Form eines Descriptors vor dem Verbindungsnamen angegeben. Gilt für die meisten Verbindungen.
- Naturstoffe mit vielen chiralen Zentren werden in der Regel auf Basis von fundamentalen Trivialnamen („stereoparents“) benannt. Dies gilt v.a. im Bereich der Alkaloide, Kohlenhydrate, Steroide und Terpene. Der Vorteil der „Stereoparents“ liegt darin, daß der Name sowohl die Konstitution als auch die Konfiguration beschreibt, und somit keine zusätzlichen Angaben bezüglich der Stereochemie notwendig sind.
- Kordinationsverbindungen benötigen spezielle Descriptoren, die eine genaue Beschreibung der Position der einzelnen Liganden ermöglicht.

Das vorliegende Skriptum beschäftigt sich ausschließlich mit systematisch benannten Verbindungen. Für Fälle, in denen der Name auf einem geläufigen Naturstoff aufgebaut wird, ist deshalb unbedingt der Index Guide der Chemical Abstracts zu Rate zu ziehen.

8.1 Systematisch benannte Verbindungen

Im traditionellen System der Kohlenhydrate wird für ein Zentrum die Konfiguration absolut angegeben, während die anderen Zentren nur relativ dazu definiert sind (z.B. D-gluco). Diese Art der Konfigurationsangabe für eine Verbindung hat den Vorteil, daß man die Absolutkonfiguration nicht kennen muß, trotzdem aber die relative Konfiguration der einzelnen Zentren angeben kann.

Bei den systemischen stereochemischen Descriptoren wird aufbauend auf dieser Methode ebenso nur ein Zentrum absolut angegeben („R“ bzw. „S“), und alle anderen Zentren werden relativ dazu definiert („cis“, „trans“, „exo“, „endo“, „syn“, „anti“, „ α “, „ β “, „R*“, „S*“, „E“ bzw. „Z“).

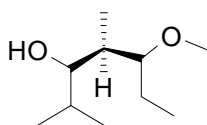
8.1.1 Die Absolutkonfiguration („R“ oder „S“)

Für zentrochirale Verbindungen wird nach Cahn-Ingold-Prelog für die einzelnen Substituenten eine Rangordnung festgelegt. Dann wird die Verbindung so angeordnet, daß der Rest geringster Priorität vom Betrachter weggerichtet ist. Sind die verbleibenden drei Substituenten nach fallender Priorität im Uhrzeigersinn angeordnet, so spricht man von „R“ (lat. „rectus“), im gegenläufigen Fall von „S“ (lat. „sinister“).

Die Priorität der Reste wird nach folgenden Kriterien bestimmt:

- Höhere Ordnungszahl
- Höhere Massenzahl
- Bei gleichem Erstatom werden die um eine Bindung weiter entfernt liegenden Atome betrachtet. Dieser Vorgang wird solange fortgesetzt, bis eine Entscheidung möglich ist.
Tritt innerhalb des Rests eine Verzweigung auf, so wird immer zuerst die Kette höchster Priorität geprüft. Ermöglicht diese keine Entscheidung, betrachtet man auch die andere Kette.
Doppel- und Dreifachbindungen werden so aufgelöst, daß die entsprechenden Bindungspartner multipliziert werden, und die freibleibenden Valenzen mit Phantomatomen besetzt werden.

Abbildung 39: Bestimmung der Absolutkonfiguration nach Cahn-Ingold-Prelog



(R)-5-Methoxy-2,4-dimethyl-3-heptanol

8.1.2 Die Relativkonfiguration

8.1.2.1 „cis“ und „trans“

Diese Descriptoren werden ausschließlich in cyclischen Strukturen mit zwei stereogenen Zentren verwendet. „Cis“ bedeutet, daß in beiden Zentren die Substituenten höherer Priorität nach CIP auf der gleichen Seite stehen, „trans“ das Gegenteil.

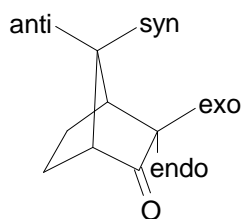
8.1.2.2 „endo“ und „exo“

Diese Descriptoren werden in Bicyclo[X.Y.Z]anes für Substituenten der X- und Y-Brücke verwendet, wobei $X \geq Y > Z > 0$ ist. Im „exo“-Isomer liegen der Substituent höherer Priorität nach CIP und die Z-Brücke auf derselben Seite, und im „endo“-Fall auf der entgegengesetzten (siehe Abbildung im Kap 8.1.2.3).

8.1.2.3 „syn“ und „anti“

Diese Descriptoren werden ausschließlich in Bicyclo[X.Y.Z]anes für Substituenten der Z-Brücke verwendet, wobei $X \geq Y > Z > 0$ ist. Zeigt der Substituent in Richtung der X-Brücke, spricht man von „syn“, andernfalls von „anti“.

Abbildung 40: Relativdescriptoren in bicyclischen Verbindungen



8.1.2.4 „a“ und „b“

Diese Descriptoren werden in cyclischen Verbindungen für Ringpositionen verwendet. Man geht so vor, daß im stereogenen Zentrum mit der kleinsten Position festgelegt wird, auf welcher Seite der Substituent höherer Priorität nach CIP liegt. Ist in den weiteren stereogenen Zentren der Substituent höherer Priorität nach CIP auf derselben Seite, so spricht man von „a“, andernfalls von „b“.

8.1.2.5 „R*“ und „S*“

Diese Descriptoren werden ähnlich den Absolutkonfigurationsbezeichnungen verwendet, beziehen sich aber immer auf das stereogene Zentrum mit der niedrigsten Nummer, welches definitionsgemäß mit „R*“ bezeichnet wird. Gleiche Konfiguration wird durch „R*“ ausgedrückt, entgegengesetzte durch „S*“.

Eine Verbindung mit zwei stereogenen Zentren, die die Absolutkonfiguration „S,S“ besitzen, hätte den stereochemischen Relativdescriptor „(R*,R*)-“.

8.1.2.6 „E“ und „Z“

Diese Descriptoren werden bei Verbindungen mit Doppelbindungen verwendet. Liegen die für beide Doppelbindungspartner unabhängig von einander bestimmten, höherwertigen Substituenten nach CIP auf einer Seite der Doppelbindung, so spricht man von „Z“ (dt. „zusammen“), andernfalls von „E“ (dt. „entgegen“).

8.1.2.7 Die optische Drehung

„+“ und „-“ werden verwendet um anzuzeigen, in welche Richtung die Ebene des linear polarisierten Lichts der Natrium D-Linie gedreht wird. Racemate erhalten den Descriptor „±“.

8.1.3 Bestimmung des stereochemischen Descriptors

- 1) Ist nur ein chirales Zentrum vorhanden, so wird für dieses die Absolutkonfiguration angegeben (z.B. (R)-). Bei zwei oder mehr chiralen Elementen wird für das Referenzzentrum die Absolutkonfiguration angegeben. In den Fällen 2a,b,e,f,g,h handelt es sich dabei um das Zentrum mit der kleinsten Nummer; im Fall 2c nimmt man das erste Zentrum für das ein „ α/β “-Descriptor zu verwenden ist; im Fall 2d nimmt man das Zentrum, das den Substituenten höchster Priorität nach CIP trägt.
- 2) Relativkonfiguration für Verbindungen mit zwei oder mehr stereogenen Zentren
 - a) Bei zwei stereogenen Zentren in einem Ring mit acht oder weniger Ringatomen wird die Relativkonfiguration mittels „cis/trans“ angegeben. Für Ringe mit mehr als acht Atomen wird „R*/S*“ verwendet.
 - b) „endo/exo“, „syn/anti“ werden für Bicyclo[X.Y.Z]ane verwendet, in denen $X \geq Y > Z > 0$ ist, und die keine anderen stereogenen Zentren besitzen. Sind diese Descriptoren nicht eindeutig, so werden die Konfigurationen mittels „R*/S*“ angegeben. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn ein Ring mit mehr als acht Atomen vorliegt, die Brückenkopfatome nicht eine normale Konfiguration aufweisen oder eine Doppelbindung zum Brückenkopf auftritt.
 - c) Für zwei oder mehr stereogene Zentren in einem Ring, die weder nach 2a noch nach 2b benannt werden können, wird das „ α/β “-System verwendet.
 - d) Sind zwei chirale Zentren nicht im selben Ring, so werden die Descriptoren „R*/S*“ ohne Positionsangabe verwendet.
 - e) Für Substanzen mit drei oder mehr stereogenen Zentren, die weder nach 2b, noch nach 2c benannt werden können, wird das „R*/S*“-System mit entsprechenden Positionsangaben verwendet.
 - f) Die Descriptoren „E/Z“ werden in abfallender Reihenfolge entsprechend den betroffenen Doppelbindungen angegeben. Liegen mehrere chirale Elemente nebeneinander vor, so werden entsprechende Positionsangaben verwendet.
 - g) Liegen sowohl cyclische als auch acyclische chirale Elemente vor, so werden die Regeln 2c-f verwendet. Ist 2c anwendbar, so ist der Ring das stereochemische Stammsystem, und das erstgenannte stereogene Ringatom ist das Referenzzentrum.
 - h) Liegen in zwei Ringsystemen (oder zwei Komponenten einer Spiroverbindung) chirale Elemente vor, so wird das Ringsystem zum stereochemischen Stammsystem, das mehr stereogene Zentren beinhaltet, oder das bevorzugte Ringsystem ist, oder den kleineren Descriptorsatz benötigt, oder die Gruppe höchster Priorität nach CIP beinhaltet.
 - i) Werden achirale Elemente in einem Ring mittel der Regeln 2a-c beschrieben, so werden alle chiralen Elemente außerhalb des Rings nach Regel 1 benannt.
- 3) Optische Drehung
 - a) Wird die Stereochemie nach Regel 1 und 2 angegeben, so wird der Descriptor für die Drehung weggelassen.
 - b) Wenn eine Substanz nur ein chirales Zentrum besitzt und die Absolutkonfiguration unbekannt ist, wird das Zeichen für die optische Drehung verwendet um zwischen den Enantiomeren zu unterscheiden.

- c) Besitzt eine Substanz mehr als ein stereogenes Zentrum unter den Bedingungen von Punkt 3b, so wird „+/-“ gemeinsam mit einem Relativ-Descriptor angegeben.

9 Koordinationsverbindungen

Moleküle oder Ionen, bei denen an ein oder mehrere zentrale Atome im Ausmaß ihrer Koordinationsvalenz andere Atome oder Gruppen gebunden sind, werden Koordinationsverbindungen genannt. Bei den Zentralatomen kann es sich um jedes Element handeln, gewöhnlich sind es aber Metalle. In diesem Zusammenhang sind alle Elemente Metalle bis auf: Ar, As, At, B, Br, C, Cl, F, He, H, I, Kr, Ne, N, O, P, Rn, Se, Si, S, Te, Xe.

Hydride von Sb, Bi, Ge, Sn und Pb werden als kovalente Verbindungen behandelt.

Die Atome oder Gruppen, die an das Zentralatom gebunden sind, werden als Liganden bezeichnet. Sie können neutral oder geladen sein. Die Atome des Liganden, die an das Zentralatom binden, werden als koordinierende Atome bezeichnet, unabhängig von der Art der Bindung die involviert ist. Ein Ligand der mehrere koordinierende Stellen besitzt wird als mehrzählig beschrieben. Bindet er über mehr als eine Stelle an ein Zentralatom wird er als chelatisierend bezeichnet, bindet er an mehr als ein Zentralatom wird er Brücke genannt.

Neutrale Verbindungen mit einatomigen Liganden werden als binäre Salze bezeichnet.

Koordinationsverbindungen können anionisch, neutral oder kationisch sein. Die Ladung wird mittels der Ewens-Bassett Zahl (Ladung des gesamten Ions) angegeben und hängt von der Ladung des Zentralatoms und der Liganden ab. Null wird nicht angegeben. Wird ein Ligand durch Verlust eines Wasserstoffs erhalten, so wird er in diesem Zusammenhang immer als negativ geladen betrachtet. In negativ geladenen Komplexen wird an das Zentralatom die Endung *-at* angehängt.

Die Liganden werden in alphabetischer Reihenfolge angegeben und die koordinierenden Atome werden sofern das möglich ist, in Form von kursiven Buchstaben in alphabetischer Reihenfolge angegeben, z.B. *N¹, N², O, O'*. Diese Buchstaben werden nicht angegeben für

reguläre Substituenten, z.B. methoxy, phenyl usw.

sigma gebundene Liganden, die keine Heteroatome besitzen oder diese nicht koordinieren
einatomige Liganden

Liganden, bei denen die Koordinationsstelle nicht eindeutig ist

neutrale oder negative organische Liganden, die aus Verbindungen abgeleitet sind, die nur ein Heteroatom enthalten, das zur Koordination fähig ist, und außerdem nicht über Kohlenstoffe gebunden sind, z.B. pyridin, N-methylmethanaminato

folgende einfache mehratomigen anorganischen Liganden: amido, ammin, aqua, selenyl, telluryl, hydroxy, imido, mercapto, phosphino und für azido, carbonyl, dinitrogen, dioxygen, nitrosyl, peroxy, carbonothioyl, wenn sie nicht als Brücken in mehrkernigen Komplexen auftreten.

Für Indexeinträge wird ein kationischer Komplex vor einem neutralen, bzw. anionischem verwendet.

In mehrkernigen Komplexen ist das Atom bevorzugt zu verwenden, das zuerst in der folgenden Liste auftritt:

Rn, Xe, Kr, Ar, Ne, He, Fr, Cs, Rb, K, Na, Li, H, Ra, Ba, Sr, Ca, Mg, Be, (Lr bis Ac), (Lu bis La), Y, Sc, Hf, Zr, Ti, Ta, Nb, V, W, Mo, Cr, Re, Tc, Mn, Os, Ru, Fe, Ir, Rh, Co, Pt, Pd, Ni, Au, Ag, Cu, Hg, Cd, Zn, Tl, In, Ga, Al, B, Pb, Sn, Ge, Si, C, Bi, Sb, As, P, N, Po, Te, Se, S, O, At, I, Br, Cl, F.

Die Namen der Liganden stimmen im allgemeinen mit den Namen überein, die nach den allgemeinen Regeln der Nomenklatur für substitutive Vorsilben zu verwenden sind; z.B.: hydro, chloro, oxo, thioxo, hydroxy, mercapto, peroxy, sulfo usw. Zu den Liganden die hier eine Ausnahme darstellen, gehören u.a. superoxido, amido, imido, chloramido, nitrido, phosphido, arsenido.

Die Namen anionischer Liganden die sich von anorganischen „Oxo“ Säuren durch Verlust eines Protons ableiten, werden so erhalten, das an die Endung des Anions (at, it) ein *-o-* angehängt wird (*-ato-*, *ito-*); z.B. hydrogensulfato, perchlorato, nitrito-*O*, cyanato-*O*, cyanato-*N*. Wird mehr als ein Proton abgespalten, so wird für den Liganden die Ewens-Bassett Zahl angegeben.

Anionische Liganden, die über eine Kohlenstoffbindung koordiniert sind und keine anionischen Heteroatombindungen zum Zentralatom aufweisen, werden als normale Radikale bezeichnet. Ebenso werden Acylliganden behandelt, wenn als einzige Heteroatombindungsstelle der Acylteil auftritt.

Von Heterocyclen durch Abstraktion eines Protons vom Heteroatom erhaltene Liganden werden ebenfalls als einfache Radikale bezeichnet, wenn keine weiteren Heteroatome auftreten.

Alle anderen organischen anionische Liganden erhalten ebenfalls die Endungen (-ato, ito), je nachdem wie das einfache Anion zu bezeichnen ist und eine nachgestellte Ewens Bassett Zahl, wenn diese ungleich -1 ist.

Sind bei einem koordinierenden Liganden π -Bindungen involviert, so wird dem Liganden ein η vorangestellt.

Sind nur einige Atome des π -Systems an das Zentralatom gebunden, so wird die Position dieser Atome vor dem η angegeben. Sind alle Atome gebunden, so schreibt man η gefolgt von einem hochgestellten Index, der die Zahl der insgesamt gebundenen Atome angibt.

Liganden, die mehrere Zentralatome miteinander verknüpfen, werden durch ein vorangestelltes μ gekennzeichnet und sind vor den nicht verknüpfenden Liganden zu nennen.

9.1 Stereochemie von Koordinationsverbindungen

Für Verbindungen mit der Koordinationszahl 1,2 oder 3 kann Stereoisomerie nur innerhalb der Liganden auftreten und wird für diese nach den allgemeinen Regeln angegeben.

Liegt ein nur dreifach koordinierter tetraedrischer Komplex vor, so wird er nach den allgemeinen Regeln für chirale Kohlenstoffverbindungen benannt.

Die folgenden Descriptoren werden zur Angabe der stereochemischen Gegebenheiten rund um ein Zentralatom verwendet:

- 1) Angabe über die Symmetrie der Koordinationsverbindung: Besteht aus einem Ein- bis Dreibuchstaben -Code, der die Geometrie des Komplexes beschreibt, gefolgt von der Koordinationszahl.

T-4	tetraedrisch	4-fach koordiniert
SP-4	quadratisch planar	4-fach koordiniert
TB-5	trigonal bipyramidal	5-fach koordiniert
SP-5	quadratisch pyramidal	5-fach koordiniert
OC-6	oktaedrisch	6-fach koordiniert
TP-6	trigonal prismatisch	6-fach koordiniert
PB-7	pentagonal bipyramidal	7-fach koordiniert
OCF-7	oktaedrisch ein Seite einfach bedeckt	7-fach koordiniert
TPS-7	trigonal prismatisch die quadratische Seite einfach bedeckt	7-fach koordiniert
CU-8	kubisch	8-fach koordiniert
SA-8	quadratisch antiprismatisch	8-fach koordiniert
DD-8	dodekaedrisch	8-fach koordiniert
HB-8	hexagonal bipyramidal	8-fach koordiniert
OCT-8	oktaedrisch transseitig je einfach bedeckt	8-fach koordiniert
TPT-8	trigonal prismatisch die dreieckigen Seiten je einfach bedeckt	8-fach koordiniert
TPS-8	trigonal prismatisch zwei quadratische Seiten je einfach bedeckt	8-fach koordiniert
TPS-9	trigonal prismatisch die quadratischen Seiten je einfach bedeckt	8-fach koordiniert

HB-9 heptagonal bipyramidal 9-fach koordiniert
9-fach koordiniert

- 2) Konfigurationszahl: Um die Atome auf jeder Achse bzw. Ebene zu identifizieren und
- 3) Chiralitätssymbol: Um Enantiomere zu unterscheiden. Tritt nur dann in Kraft, wenn der Komplex keine Symmetrieebene besitzt.

- a) für T-4-Komplexe: weder noch notwendig
- b) für SP-4-Komplexe:

Konfigurationszahl: Reihung der Liganden nach Prioritäten: Angabe der Prioritätsnummer des Liganden, der trans zum Liganden mit der Priorität eins steht.

Chiralitätssymbol: nicht notwendig

- c) TB-5-Komplexe:

Konfigurationszahl: Die Liganden auf der Hauptachse werden in abfallender Priorität angegeben.

Chiralitätssymbol: Wenn Liganden in der Ebene normal auf die Hauptachse, in abfallender Priorität im Uhrzeigersinn angeordnet sind, spricht man von **C**, sonst von **A**.

- d) SP-5-Komplexe:

Konfigurationszahl: Setzt sich zusammen aus der Prioritätszahl des Liganden auf der Spitze und der Zahl des Liganden in der Ebene, der trans zu dem Liganden in der Ebene positioniert ist, der die höchsten Priorität in der Ebene hat.

Chiralitätssymbol: Man sieht von der Spitze auf die Ebene und betrachtet die Abfolge Atom höchster Priorität zu dem Nachbarn mit der zweithöchsten Priorität. Wenn diese Abfolge im Uhrzeigersinn stattfindet spricht man von **C**, sonst von **A**.

- e) OC-6-Komplexe:

Konfigurationszahl: Die erste Stelle ergibt sich aus der Positionsnummer des Liganden, der gegenüber dem Liganden mit der Nr. 1 liegt, und die zweite Stelle aus der Position des Atoms, das trans zum Atom mit der höchsten Priorität in der Ebene ist.

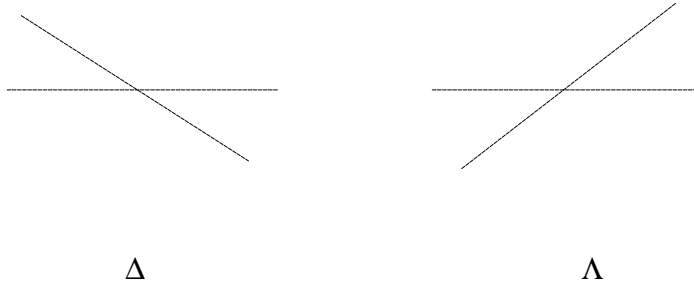
Chiralitätssymbol: Man sieht vom Liganden mit der Nr. 1 auf die Ebene und betrachtet die Abfolge Atom höchster Priorität zu dem Nachbarn mit der zweithöchsten Priorität. Wenn diese Abfolge im Uhrzeigersinn stattfindet spricht man von **C**, sonst von **A**.

Für oktaedrische Komplexe mit zwei oder drei bidentaten Liganden in einer zueinander schiefen Anordnung werden die Chiralitätssymbole **D** und **L**, die sonst für helicale Chiralitätsangaben herangezogen werden, verwendet.

D = rechtsgängige Helix

L = linksgängige Helix

Die Descriptoren können auf folgende Abbildungen reduziert werden und sind in dieser Form für Komplexe mit bidentaten Liganden anwendbar.



Für identische tridentate Liganden wird ein Satz der ligandisierenden Atome mit einem Apostroph versehen um zwischen Enantiomeren unterscheiden zu können.

f) TP-6-Komplexe:

Konfigurationszahl: Setzt sich zusammen aus der Prioritätszahl der Liganden, die der bevorzugten dreieckigen Seite gegenüberliegen. Die bevorzugte dreieckige Seite beinhaltet mehr bevorzugte Liganden. Die Abfolge der Zahlen entspricht der Abfolge der Prioritätszahlen auf der bevorzugten Seite.

Chiralitätssymbol: Ergibt sich aus der Abfolge der Prioritäten auf der nicht bevorzugten dreieckigen Seite. Abfallende Priorität im Uhrzeigersinn bezeichnet man mit **C**, sonst mit **A**.

4) Stereochemische Descriptoren für die Liganden nach den allgemeinen Regeln