

Nomenklatur

→ IUPAC-Nomenklatur incl. CIP-Regeln

→ traditionelle Nomenklaturen

→ IUPAC muß aktiv angewendet werden können, die anderen müssen passiv verstanden werden können.

IUPAC-Nomenklatur

(vereinfacht und abgespeckt auf den Stoff der OC-Grundvorlesung)

Abfolge a) b) c) abarbeiten, bis es eine Entscheidung gibt.

1. Der Name hat die Form:

Substituenten-Stamm-Endung

oder komplexer geschrieben:

(Stereoprefixe)- [PosNums-Subst.yl]-PosNums-Stamm- [Endung]

[] = *mehrfach möglich*

2. Der Stamm

a) Ring vor Kette

b) höchste Funktionalität

CHO > CO > OH > C≡C > CH=CH > Alkan

c) größte Substitution

3. Die Namen der Stämme leiten sich ab von:

Alkane: Meth(an), Eth(an), ..

Ringe: Cyclohex(an), Benzol, ...

4. Der Stamm wird nummeriert:

a) kleinste Nummern

b) höchste Funktionalität auf kleinste Nummer

5. Die Funktionalitäten des Stammes werden an den Stamm angehängt:

Die Suffixe sind:

-al -CHO (Aldehyde)

-ol -OH (Alkohole)

-on -CO- (Ketone)

-in -C≡C- (Alkine)

-en -CH=CH-

-an Alkane, Cycloalkane (ohne Mehrfachbindungen)

Benötigte Positionsnummern werden vor dem Stamm geschrieben.

5a. Mehrfache identische Funktionalitäten werden durch Zahlwörter angegeben:

di, tri, tetra, → **trien**, **diol**, etc.

5b. Unterschiedliche Funktionalitäten werden entsprechen dieser Reihenfolge gelistet:

an - en - in - ol - on - al

5c. **on**, **ol** und **al** werden immer mit **an** oder **en** oder **in** verbunden

5d. **an** wird nicht geschrieben, wenn **en** oder **in** benutzt wird.

5e. **ol** wird nicht gemeinsam mit **al** oder **on** verwendet. Stattdessen wird die OH Gruppe als hydroxy Substituent aufgeführt.

6. Die Substituenten werden mit ihrer Positionnummer vor den Stamm geschrieben. Der Name leitet sich so ab:

- Alkylsubstituenten: Stamm + Suffix *yl*, z.B. Methyl-
- Halogene: der direkte Name, z.B. Brom-, Chlor-, ..
- Benzolring: Phenyl-

7. Mehrere identische Substituenten werden mit Zahlwörter (di, tri, tetra) zusammengefaßt.

8. Mehrere unterschiedliche Substituenten werden alphabetisch sortiert. Zahlwörter werden für die Sortierreihenfolge nicht berücksichtigt.

9. Ist der Substituent selbst substituiert, wird für ihn ein Name analog Regel 1-8 gebildet, der auf *yl* endet (nicht auf *an*). Allerdings beginnt die Nummerierung im Substituenten mit dem Atom, das an den Stamm gebunden ist (statt Regel 4).

10. Substituierte Substituenten werden als Ganzes eingeklammert, wenn sie selber eine Positionsnummer relativ zum Stamm haben.

z.B. 5-(2-Methylpropyl)-nonan

11. Bezeichnungen der Stereochemie gemäß der CIP-Regeln (R/S, E/Z) werden in Klammern nach ganz vorne gestellt:

(S)-
(3S,4R)-

12. Die CIP-Regeln bestimmen die Prioritäten von Substituenten für Stereozentren und Doppelbindungen. Die Priorität ergibt sich zu:

Die Prioritäten der Substituenten werden schalenweise verglichen, bis es einen Unterschied gibt.

Zunächst entscheidet die höchste Ordnungszahl (OZ)

Dann entscheidet die Summe Ordnungszahl*Bindungsordnung

Dann entscheidet die nächste Schale analog

13. CIP für Stereozentren: Es müssen vier Substituenten unterschiedlicher Priorität vorliegen. Die niedrigste Priorität (d) wird nach hinten gedreht; der Drehsinn $a \rightarrow b \rightarrow c$ entscheidet über R (rechts) und S (sinister = links). Achtung: auch ein Elektronenpaar kann als Substituent (OZ=0) gewertet werden.

14. CIP für Doppelbindungen: Auf beiden Seiten der Doppelbindung müssen zwei unterschiedliche Substituenten sein. An beiden Enden der Doppelbindung werden jeweils die Substituenten der höchsten Priorität bestimmt. Liegt sie auf einer Seite ist es Z, sonst E.

15. Disubstituierte aliphatische Ringe können auf durch die vorangestellten Terme *cis/trans* unterschieden werden.

16. Positionsnummern werden nur geschrieben, wenn sie zur Eindeutigkeit nötig sind

17. Bindestriche werden nur zwischen Zahlen und Text eingefügt, sowie zwischen einer geschlossenen Klammer und weiterem Text.

18. Nur der erste Buchstabe wird groß geschrieben.

Namen der Alkane

| n | Name | Formel |
|----------|----------------------------|------------------------------|
| 1 | Methan | CH_4 |
| 2 | Ethan | C_2H_6 |
| 3 | Propan | C_3H_8 |
| 4 | Butan | C_4H_{10} |
| 5 | Pentan | C_5H_{12} |
| 6 | Hexan | C_6H_{14} |
| 7 | Heptan | C_7H_{16} |
| 8 | Octan | C_8H_{18} |
| 9 | Nonan | C_9H_{20} |
| 10 | Decan | $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ |
| 11 | Undecan | $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ |
| 12 | Dodecan | $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ |
| 13 | Tridecan | $\text{C}_{13}\text{H}_{28}$ |
| 14 | Tetradecan | $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ |
| 15 | Pentadecan | $\text{C}_{15}\text{H}_{32}$ |
| 16 | Hexadecan | $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$ |
| 17 | Heptadecan | $\text{C}_{17}\text{H}_{36}$ |
| 18 | Octadecan | $\text{C}_{18}\text{H}_{38}$ |
| 19 | Nonadecan | $\text{C}_{19}\text{H}_{40}$ |
| 20 | Icosan (veraltet: Eicosan) | $\text{C}_{20}\text{H}_{42}$ |

Andere Nomenklaturen:

a) Die Hauptfunktion wird als Stamm genommen und der Rest als Substituent mit yl davor gestellt:

Hauptfunktionen:

- OH Alkohol
- CHO Aldehyd
- CO- Keton

z.B.: Methylalkohol,

Ketone haben zwei Substituenten:

z.B.: Ethylmethylketon, Dipropylketon

b) Unterscheidung isomerer Verbindungen durch

- Iso Methylverzweigung am vorletzten Atom
- Neo Dimethylverzweigung am vorletzten Atom
- prim, sek, tert Klassifikation der Kohlenstoffatome

Achtung: hier hat der IUPAC-Name immer einen anderen Stamm !!

Isopentane = 2-Methylbutan

c) Besondere Namen einiger Substituenten:

| | | |
|----------------------|--------|-------------|
| H-CO- | Formyl | (Methanoyl) |
| CH ₃ -CO- | Acetyl | (Ethanoyl) |

d) Positionsbezeichnung am Benzol

o,m,p = ortho, meta, para

ipso

e) Traditionelle Bezeichnungen für die Stereochemie:

D/L gemäß der Fischer-Projektion

cis/trans bei Doppelbindungen