



Herbert Bartsch

Die systematische Nomenklatur
organischer Arzneistoffe

SpringerWienNewYork

Univ.-Prof. Dr. Herbert Bartsch
Institut für Pharmazeutische Chemie, Pharmaziezentrum,
Wien, Österreich

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt.
Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der
Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem
oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei
nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten.

© 1998 Springer-Verlag/Wien

Satz: Reproduktionsfertige Vorlage des Autors

Graphisches Konzept: Ecke Bonk

Gedruckt auf säurefreiem, chlorfrei gebleichtem Papier – TCF
SPIN: 10655996

ISBN-13: 978-3-211-83122-9
DOI: 10.1007/978-3-7091-7512-5

e-ISBN-13: 978-3-7091-7512-5

Vorwort

Dieses Buch soll sich ganz bewußt nicht in die beträchtliche Zahl von Werken einreihen [1-4], die mehr oder weniger eine Auflistung und teils interpretierende Zusammenstellung der von der IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) erstellten Regeln zur Nomenklierung organischer Verbindungen darstellen.

Vielmehr soll durch die Aufbereitung der durch zahllose Regeln oft verwirrend erscheinenden Thematik all jenen, die sich studien- oder berufsbedingt mit der systematischen Nomenklatur von Arzneistoffen auseinandersetzen müssen, ein brauchbares Hilfsmittel für die Bewältigung der wichtigsten Nomenklaturprobleme in die Hand gegeben werden.

Es wurde in den meisten Fällen ganz bewußt darauf verzichtet, alle Nomenklaturregeln taxativ aufzulisten, sondern versucht, durch kompakte Darstellung der wichtigsten Regeln im Zusammenwirken mit insgesamt 115 exemplarischen Beispielen die Problematik der systematischen Nomenklatur von Arzneistoffen zu diskutieren. Eine Vertiefung der durch das Studium der einzelnen Kapitel erworbenen Fertigkeit soll durch die im Anhang II zusammengestellten 38 Übungsbeispiele ermöglicht werden. Um einen möglichst großen Effekt zu erzielen, sollten besonders die Übungsbeispiele aufbauend bearbeitet werden.

Als Hinweis für den Benutzer sei vermerkt, daß alle in den Beispielen und Übungen wiedergegebenen Formeln von Ringsystemen den Orientierungsregeln entsprechend angeordnet sind.

Auf Grund der beabsichtigten Beschränkung ist es natürlich nicht möglich, alle anfallenden Nomenklaturprobleme zu lösen (für spezielle Problemstellungen sei auf die Literatur [1-4] verwiesen), jedoch sollte der Benutzer dieses Buches imstande sein, einen Großteil der zum Arzneimittelschatz zählenden organischen Verbindungen zu nomenklieren.

Zum Aufbau und Inhalt des Buches ist zu bemerken, daß alle wichtigen Grundkörper und Nomenklatorsysteme diskutiert werden, die zur systematischen Bezeichnung von Arzneistoffen benötigt werden. So werden auch die wichtigen Wirkstoffgruppen der Steroide und Prostaglandine in eigenen Kapiteln besprochen. Nicht aufgenommen wurden hingegen die Carotinoid- und Terpenkohlenwasserstoffe sowie Kohlenhydrate, da deren Bezeichnung weitestgehend mit Hilfe von Trivialnamen erfolgt.

Ich hoffe, daß es mir gelungen ist, durch das Einbringen einer langjährigen Lehrererfahrung das trockene Gebiet der systematischen Nomenklatur etwas aufgelockert zu haben, sodaß der Benutzer dieses Buches sogar ein wenig Spaß an der Lösung von Nomenklaturproblemen empfinden wird.

Dank

Den Dank an alle, die zum Gelingen dieses Buches beigetragen haben, abzustatten, ist nicht nur angenehme Pflicht, sondern echtes Bedürfnis. Namentlich möchte ich mich bei Frau Ass.-Prof. Dr. Hannelore Kopelent-Frank und Herrn ao. Prof. Dr. Thomas Erker für die Diskussionen und die kritische Durchsicht der verschiedenen Fassungen des Manuskripts bedanken. Frau Ing. Antonia Beran danke ich insbesondere für die Unterstützung bei der Erstellung des Manuskripts.

Mein besonderer Dank gilt jedoch meiner Tochter, Frau Mag. pharm. Regine Weinlich (geb. Bartsch), die mir aus der Sicht einer berufstätigen Pharmazeutin wertvolle Hinweise und Anregungen für eine benutzerfreundliche Abfassung des Textes gegeben hat.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Wozu ist eine systematische Nomenklatur nötig?	1
1.2	Die Entwicklung der systematischen Nomenklatur	2
1.3	Der systematische Name	2
2	Acyclische Kohlenwasserstoffe	3
2.1	Unverzweigte Ketten	3
2.2	Kohlenwasserstoffreste und verzweigte Ketten	4
2.2.1	Benennung von Kohlenwasserstoffresten	4
2.2.2	Benennung verzweigter Ketten	4
2.2.2.1	Multiplizierende Affixe	5
2.3.	Beibehaltene Trivialnamen	6
3	Monocyclische Kohlenwasserstoffe	7
3.1	Nicht aromatische Carbocyclen und ihre Reste	7
3.2	Aromatische Carbocyclen und ihre Reste	8
4	Nomenklatur substituierter Verbindungen	10
4.1	Substitutive Nomenklatur	10
4.1.1	Charakteristische Gruppen	10
4.1.1.1	Charakteristische Gruppen, die nur als Präfixe bezeichnet werden	10
4.1.1.2	Charakteristische Gruppen, die als Suffixe oder Präfixe bezeichnet werden	11
4.1.2	Anleitung zur Namenskonstruktion substituierter Verbindungen	12
4.1.3	Anleitung zur Formelkonstruktion aus einer Nomenklatur	13
4.2	Radikofunktionelle Nomenklatur	14
4.3	Additive Nomenklatur	15
4.4	Subtraktive Nomenklatur	16
4.5	Konjunktive Nomenklatur	16
4.6	Austauschnomenklatur („a“-Nomenklatur)	18
4.7	Nomenklatur von Verbänden aus gleichen Einheiten, die über bi- oder multivalente Radikale verknüpft sind	19
5	Anellierte (kondensierte) Kohlenwasserstoffe	21
5.1	Trivialnamen	21
5.2	Anellierungsamen	22
5.2.1	Unterscheidung isomerer Verbindungen	23
5.2.2	Orientierung und Numerierung des Gesamtsystems	24
5.3	Hydrierte Verbindungen	26
5.3.1	Hydrierte Verbindungen und Suffixe	26
5.4	Reste von anellierten Kohlenwasserstoffen	28
5.4.1	Einwertige Reste	28

5.4.2	Zweiwertige Reste	29
5.5	Kohlenwasserstoffbrücken in anellierten Systemen	30
6	Heterocyclen	32
6.1	Monocyclische Heterocyclen	32
6.1.1	Erweitertes Hantzsch-Widman-System	32
6.1.2	Monocyclen mit mehr als zehn Ringgliedern	34
6.2	Trivial- und Semitrivialnamen	34
6.3	Anellierte heterocyclische Systeme	40
6.3.1	Auswahlkriterien für die Basiskomponente in anellierten Heterocyclen	40
6.3.2	Orientierung und Numerierung anellierter Heterocyclen	43
6.3.3	Benzoanellierte Heterocyclen	44
6.4	Hydrierte Verbindungen	45
6.4.1	Hydrierte Verbindungen und Suffixe	46
6.5	Reste von Heterocyclen	48
6.5.1	Einwertige Reste	49
6.5.2	Zweiwertige Reste	49
6.6	Heterobrücken in anellierten Systemen	51
7	Ringsequenzen	53
7.1	Gleiche Ringsysteme	53
7.2	Ungleiche Ringsysteme	54
7.2.1	Kriterien zur Auswahl des ranghöchsten Ringsystems	54
8	Brückenverbindungen	56
8.1	Bicycloverbindungen	56
8.1.1	Kohlenwasserstoffe	56
8.1.2	Heterocyclen	58
8.2	Tricycloverbindungen	58
9	Spiroverbindungen	60
9.1	Methode 1	60
9.1.1	Spiroverbindungen mit zwei Ringen	60
9.1.2	Spiroverbindungen unter Beteiligung mindestens eines anellierten Systems	61
9.2	Methode 2	62
10	Stereochemische Nomenklatur	64
10.1	Stereoisomerie an Ringverbindungen	64
10.2	Stereoisomerie an Doppelbindungen	65
10.3	Die Absolutkonfiguration asymmetrischer Kohlenstoffatome	66
11	Steroide	69
12	Prostaglandine	76
Anhang I		77

Inhaltsverzeichnis IX

Anhang II 85

Literatur 106

Sachverzeichnis 107

1 Einleitung

1.1 Wozu ist eine systematische Nomenklatur nötig?

Um diese Frage an einem Beispiel des täglichen Lebens zu dokumentieren, möchte ich Sie, werte Leserin, werter Leser, fragen, ob Sie **Maria** kennen?

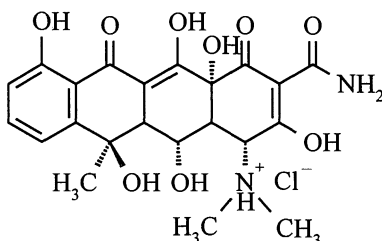
Jeder kennt wohl eine Person namens Maria, aber man wird kaum von demselben Individuum sprechen.

Wenn man nun nach **Maria Katharina SCHNEIDER** fragt, wird sich auf Grund der Präzisierung des Namens der mögliche Personenkreis bereits wesentlich eingeschränkt haben, und wenn noch die Adresse – **A-8382 Mogersdorf** (ein kleiner Ort in Österreich) – angegeben wird, kann man sicher sein, von derselben Person zu sprechen.

Eine weitere Möglichkeit, ein Individuum eindeutig zu identifizieren, besteht in der Zuweisung einer Nummer (z.B. Vers.-Nr. 3182 17 01 58).

Um die Identität einer Person eindeutig zu beschreiben, muß diese also entweder benannt (nomenklirt) oder numerisch erfaßt werden.

In ähnlicher Weise kann nun mit „chemischen Individuen“ verfahren werden: Man kann die unten abgebildete Verbindung entweder mit einer **Nummer**, welche nur und ausschließlich dieser Struktur zugeordnet ist, versehen (= **Chemical Abstracts Service-Nr.** = **CAS-Nr.**), oder man hat die Möglichkeit, die Substanz mit eindeutigen **Kurzbezeichnungen** (WHO- bzw. Arzneibuchbezeichnungen) bzw. mit Hilfe einer **systematischen Nomenklatur** eindeutig zu charakterisieren.



CAS-Nr: 2058-46-0

EuAB, rINN: Oxytetracyclini hydrochloridum

ÖAB: Hydroxytetracyclinum hydrochloricum

system. Nomenkl.: 4-Dimethylamino-1,4,4a,5,5a,6,11,12a-octahydro-3,5,6,10,12,-12a-hexahydroxy-6-methyl-1,11-dioxo-2-naphthacencarboxamid hydrochlorid

Da nun weder eine Nummer noch die erwähnten Kurzbezeichnungen eine Auskunft über die tatsächliche Struktur einer chemischen Verbindung geben, ist es nicht nur sinnvoll, sondern nötig, sich mit **systematischer Nomenklatur** als einziger

Möglichkeit, ein chemisches Individuum allgemeinverständlich und reproduzierbar zu beschreiben, zu befassen.

1.2 Die Entwicklung der systematischen Nomenklatur

Zu Beginn der Benennung organischer Verbindungen wurden **Trivialbezeichnungen** kreiert, die häufig von der natürlichen Quelle abgeleitet wurden und teilweise heute noch Verwendung finden: z.B. *Essigsäure* (u.a. Inhaltsstoff des Speiseessigs), *Ameisensäure* (Abwehrstoff der roten Waldameise), *Benzoessäure* (Destillationsprodukt des Benzoeharzes), *Vanillin* (Inhaltsstoff der Vanilleschote), *Weingeist* (Inhaltsstoff des Weines und von Spirituosen).

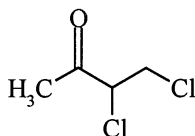
Mit zunehmender Anzahl isolierter und insbesondere synthetisierter Verbindungen etablierten sich „private“ **Nomenklatorsysteme**, die jedoch mit der Zeit zu einer Art babylonischer Sprachverwirrung führten, sodaß im Jahre 1892 in der Schweiz die „**Genfer Nomenklaturkommission**“ tagte, die erstmals Regeln zur systematischen Bezeichnung organischer Verbindungen erarbeitete. Unter anderem führte jedoch der damals unternommene Versuch der Ausrottung von bis dahin gebräuchlichen Trivialnamen dazu, daß die Regeln insgesamt nur widerwillig angenommen wurden.

Erst 65 Jahre später wurden von der IUPAC im Jahre 1957 unter Beibehaltung vieler Trivialnamen Regeln zur systematischen Nomenklatur von Verbindungen erstellt, die unter Vermeidung der Fehler von Genf eine Reihe alternativer Benennungsmöglichkeiten erlaubt. Dieses als **IUPAC-Nomenklatur** allgemein anerkannte und im wissenschaftlichen Bereich angewandte Regelwerk bildete auch die Basis der seit 1972 eingeführten **CA-Register-Nomenklatur**, die auf Grund der Monopolstellung der CA (Chemical Abstracts) keine Alternativbenennungsmöglichkeiten mehr zuläßt und einen Trend zur Minimierung von Trivialnamen aufweist.

1.3 Der systematische Name

Der nach den IUPAC-Regeln gebildete systematische Name (die systematische Nomenklatur) einer Verbindung setzt sich prinzipiell aus verschiedenen Teilen zusammen, von denen die wichtigsten im Folgenden aufgelistet und auch in dem angeführten einfachen Beispiel weitestgehend enthalten sind:

1. Namensstamm (but)
2. Endung (an)
3. Suffixe (on)
4. Präfixe (chlor)
5. Affixe (di)
6. Hilfszeichen wie Locanten (2,3,4), Klammern, Bindestriche etc.



3,4-Dichlor-2-butanon

2 Acyclische Kohlenwasserstoffe

Als Einstieg in das weite Gebiet der systematischen Nomenklatur wollen wir uns zu Beginn in diesem Kapitel mit der Benennung unsubstituierter offenkettiger (acyclischer) Kohlenwasserstoffe (KW) befassen.

2.1 Unverzweigte Ketten

Zur Benennung unverzweigter Kohlenwasserstoffketten wird der **Namensstamm**, der die Anzahl der C-Atome wiedergibt (von 1 bis 4 C-Atomen werden die Stämme trivial bezeichnet, während ab 5 C-Atomen die entsprechenden griechischen Zahlworte Anwendung finden), mit einer Endung versehen, mit welcher der **Sättigungsgrad** ausgedrückt wird. Die in den drei Formelbeispielen verwendeten Namensstämme sind *kursiv* gedruckt.

Namensstamm

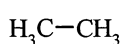
1 C: Meth	6 C: <i>Hex</i>	11 C: Undec	16 C: Hexadec
2 C: <i>Eth</i>	7 C: Hept	12 C: Dodec	17 C: Heptadec
3 C: <i>Prop</i>	8 C: Oct	13 C: Tridec	18 C: Octadec
4 C: But	9 C: Non	14 C: Tetradec	19 C: Nonadec
5 C: Pent	10 C: Dec	15 C: Pentadec	20 C: Eicos

Sättigungsgrad

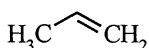
-an (gesättigter KW)

-en (KW mit Doppelbindung)

-in (KW mit Dreifachbindung); anstelle von -in setzt sich immer mehr die Endung -yn durch.



Ethan



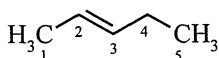
Propen



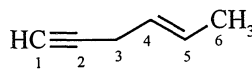
Hexin

Bei mehr als einer Doppel- bzw. Dreifachbindung wird vor der jeweiligen Endung (-en oder -in) die Anzahl durch die entsprechenden Zahlworte angegeben: di (2), tri (3), tetra (4), penta (5) usw.; z.B. -dien, -trien; -diin, -triin.

Die Numerierung des Grundkörpers erfolgt in der Weise, daß die Mehrfachbindung den niedrigsten Locanten (Nummer des C-Atoms, von dem die Mehrfachbindung ausgeht) erhält; bei mehreren Mehrfachbindungen wird in der Weise beziffert, daß die Mehrfachbindungen insgesamt die niedrigste Nummernfolge (d.h. das niedrigste Set) erhalten.

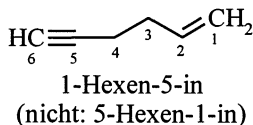


2-Penten
(nicht: 3-Penten)



4-Hexen-1-in (Set 1,4)
(nicht: 2-Hexen-5-in; Set 2,5)

Bei gleichem Set erhält die Doppelbindung den niedrigeren Locanten als die Dreifachbindung.



2.2 Kohlenwasserstoffreste und verzweigte Ketten

2.2.1 Benennung von Kohlenwasserstoffresten

Zur Benennung von Kohlenwasserstoffresten werden an den Wortstamm des Kohlenwasserstoffs die entsprechenden **Endungen** angefügt und diese Namen als **Präfixe** in alphabetischer Ordnung vor der Stammverbindung genannt.

Endungen

-yl: für einbindige Reste

-ylen: für zweibindige Reste, deren Valenzen von verschiedenen C-Atomen ausgehen (Ausnahme: Methylene für $\text{CH}_2=$)

-yliden: für zweibindige Reste, deren Valenzen vom selben C-Atom ausgehen

-ylidin: für dreibindige Reste, deren Valenzen vom selben C-Atom ausgehen

Methyl
 CH_3-

Ethylen
 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$

Ethyliden
 $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{}$

Propylidin
 $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}\equiv$

Die Bezifferung der Alkylreste erfolgt prinzipiell in der Weise, daß die **Radikalstelle** (das C-Atom mit der freien Valenz) den **Locanten 1** erhält.

2.2.2 Benennung verzweigter Ketten

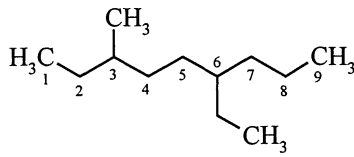
Die **Wahl der Hauptkette** erfolgt gemäß den nachstehenden Auswahlkriterien:

1. C-Kette mit der maximalen Zahl an Mehrfachbindungen
2. längste C-Kette mit den meisten Mehrfachbindungen (wenn vorhanden)
3. längste C-Kette mit der maximalen Zahl an Doppelbindungen
4. längste C-Kette mit der maximalen Zahl an Doppelbindungen (wenn vorhanden) und den meisten Seitenketten

Wenn die Wahl der Hauptkette gemäß den genannten Auswahlkriterien getroffen ist, werden die Seitenketten als Präfixe alphabetisch geordnet dem Namen der Stammverbindung vorangestellt.

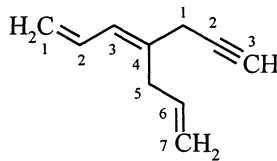
Die **Bezifferung der Hauptkette** erfolgt bei Vorhandensein von Mehrfachbindungen gemäß oben erwähnten Regeln, wenn eine gesättigte Verbindung vorliegt, in der Weise, daß die Präfixe das niedrigste Set erhalten.

Beispiel 1: Da die Verbindung keine Mehrfachbindungen enthält, kommt Kriterium 2 zum Tragen.



6-Ethyl-3-methylnonan

Beispiel 2: Die Verbindung besitzt zwei C-Ketten mit je drei Mehrfachbindungen und der gleichen Anzahl von C-Atomen (7). Daher kommt Kriterium 3 (längste Kette mit den meisten Doppelbindungen) zum Tragen. Die Stammverbindung wurde durch die Auswahlkriterien als C-7-Kohlenwasserstoff (hept) mit drei Doppelbindungen (trien) definiert. Aus phonetischen Gründen wird zwischen die beiden Konsonanten (hepttrien) ein **a** eingefügt (heptatrien). Die Bezifferung der Stammverbindung wird durch das niedrigste Set für die drei Doppelbindungen (1,3,6 und **nicht** 1,4,6) definiert. Das an C-4 substituierte *Präfix* wird gesondert beziffert (Radikalstelle 1) und mit dem dazugehörigen Locanten (2 bezieht sich auf die Stellung der Dreifachbindung) in runde Klammer gesetzt.



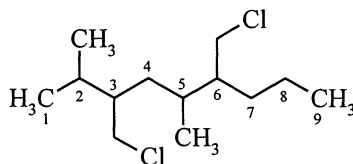
4-(2-Propinyl)-1,3,6-heptatrien

2.2.2.1 Multiplizierende Affixe

Neben den bereits bei Mehrfachbindungen genannten Zahlworten, die auch für unsubstituierte Reste eingesetzt werden, finden Affixe Verwendung, welche die Anzahl identer substituiertes Reste angeben.

Identen unsubstituierten Reste: di tri tetra penta usw.
 Identen substituierten Reste: bis tris tetrakis pentakis usw.

Beispiel 3: In diesem Beispiel ist ein Nonan mit zwei unsubstituierten Methylresten (*dimethyl*) und zwei durch Chlor weiter substituierten Methylresten [*bis(chlormethyl)*] versehen. Die alphabetische Ordnung der Reste erfolgt nach dem Anfangsbuchstaben des Einzelsubstituenten (*chlormethyl* vor *methyl*).

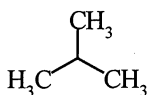


3,6-Bis(chlormethyl)-2,5-dimethylnonan

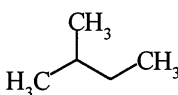
2.3 Beibehaltene Trivialnamen

In der IUPAC-Nomenklatur werden die im Anschluß aufgelisteten Kohlenwasserstoffe und Reste trivial bezeichnet; diese Namen kommen mit Ausnahme von Vinyl- und Allyl- allerdings ausschließlich für die unsubstituierten Strukturen zur Anwendung. Eine Substitution mit funktionellen Gruppen bedingt eine systematische Bezeichnung.

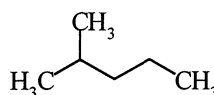
Gesättigte Kohlenwasserstoffe und Kohlenwasserstoffreste



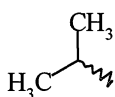
Isobutan



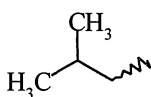
Isopentan



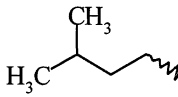
Isohexan



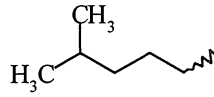
Isopropyl



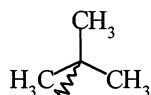
Isobutyl



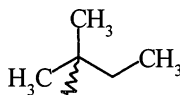
Isopentyl



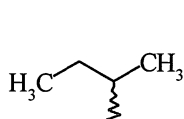
Isohexyl



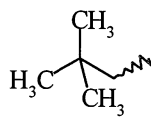
tert. Butyl



tert. Pentyl

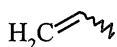


sec. Butyl

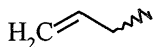


Neopentan (-yl)

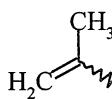
Ungesättigte Kohlenwasserstoffe und Kohlenwasserstoffreste



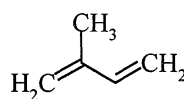
Vinyl



Allyl



Isopropenyl



Isopren

Übung 1: siehe Anhang II

3 Monocyclische Kohlenwasserstoffe

Bei monocyclischen Kohlenwasserstoffen unterscheiden wir einerseits Verbindungen, welchen der gesättigte Carbocyclus zugrundeliegt und bei denen die Mehrfachbindungen durch die entsprechenden Endungen wiedergegeben werden, sowie andererseits solche, die sich vom ungesättigten Grundkörper Benzol ableiten.

3.1 Nicht aromatische Carbocyclen und ihre Reste

Zur Benennung nicht aromatischer Carbocyclen wird dem zugrundeliegenden Kohlenwasserstoff das Präfix **Cyclo-** vorangestellt. Die Endung gibt, wie bei den acyclischen Kohlenwasserstoffen, den Sättigungsgrad an. Auch die Bezifferung erfolgt gemäß den bereits angeführten Regeln:

- Mehrfachbindungen möglichst niedrig;
- bei gleichem Set Doppelbindungen vor Dreifachbindungen (auf Grund des Bindungswinkels von 180° nur bei großen Ringen möglich).

Beispiel 4:

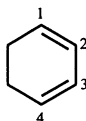
Kohlenwasserstoff mit 5 C-Atomen



Cyclopentan

Beispiel 5:

Kohlenwasserstoff mit 6 C-Atomen und 2 Doppelbindungen von C-1 und C-3



1,3-Cyclohexadien

Das Präfix **Cyclo-** ist ein Beispiel einer bestimmten Art von Vorsilben, welche als „**nicht loslösbar**“ bezeichnet werden und somit einen fixen Bestandteil des Grundkörpers bilden.

Wir unterscheiden somit **zwei Arten von Vorsilben:**

- dem Grundkörper alphabetisch vorangestellte Vorsilben (z.B. Alkylreste);
- Vorsilben, die als Bestandteil des Grundkörpers betrachtet werden.

Nicht loslösbare Silben:

- ringbildende: cyclo, bicyclo, tricyclo, spiro
- ringaufbrechende: seco
- die Ringgröße verändernde: nor, homo
- die Verschmelzung von zwei oder mehr Ringen anzeigende: benzo, imidazo, pyrido, cyclopenta usw.
- in Ringen oder Ketten C-Atome ersetzende: aza, oxa, thia usw.
- die Stellung von Ring- oder Kettengliedern verändernde: iso, sec, tert
- indizierter Wasserstoff
- brückenbildende: ethano, epoxy usw.

Die Vorsilbe hydro-, welche gemäß IUPAC wahlweise als loslösbar und nicht loslösbar eingestuft werden kann, sollte ausschließlich als normales, alphabetisch zu ordnendes Präfix Verwendung finden.

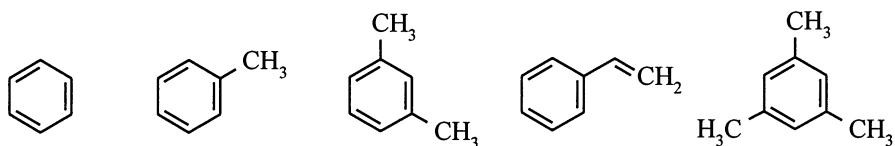
Die **Reste** der nichtaromatischen Carbocyclen werden gemäß den Regeln für acyclische Kohlenwasserstoffe bezeichnet. Die Radikalstelle erhält die Ziffer 1, d.h., sie besitzt Priorität gegenüber Mehrfachbindungen.

3.2 Aromatische Carbocyclen und ihre Reste

Die monocyclischen aromatischen Carbocyclen werden systematisch als **substituierte Benzole** bezeichnet. Die Positionen der Substituenten werden durch Locanten definiert. Bei disubstituierten Benzolen sind für die Stellungen 1,2-, 1,3- und 1,4- nach wie vor die Bezeichnungen *o-* (*ortho*), *m-* (*meta*) und *p-* (*para*) in Gebrauch.

Bei der Bezifferung von **Resten** besitzen die Radikalstellen Vorrang vor den Substituenten.

Im Folgenden werden die wichtigsten Vertreter der mit **Trivialnamen** bezeichneten aromatischen Monocyclen und Reste angeführt (die in Klammer gesetzten Locanten beziehen sich auf die jeweils abgebildeten Isomeren; so sind z.B. natürlich auch die isomeren *o-* und *p-*Xylole trivial bezeichnete Verbindungen):



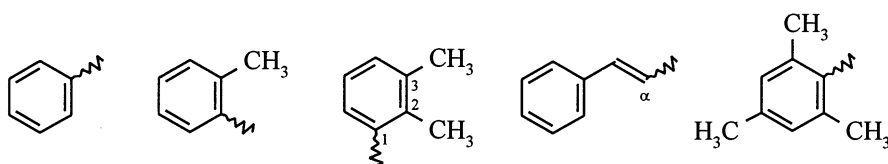
Benzol

Toluol

(m)-Xylol

Styrol

Mesitylen



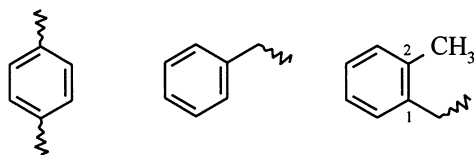
Phenyl

(o)-Tolyl

(2,3)-Xylyl

Styryl

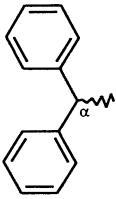
Mesityl



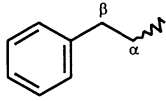
(p)-Phenylene

Benzyl

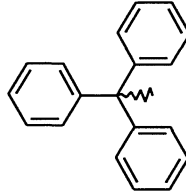
(2)-Methylbenzyl



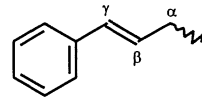
Benzhydryl



Phenethyl



Trityl



Cinnamyl

Zur Unterscheidung der Positionierung eines Substituenten am Ring oder in der Seitenkette werden die Atome der Kette mit griechischen Kleinbuchstaben gekennzeichnet.

Übung 2: siehe Anhang II

4 Nomenklatur substituierter Verbindungen

Zur Nomenklierung von substituierten Verbindungen stehen mehrere, sich teils ergänzende, teils als Alternativen anwendbare Nomenklatorsysteme zur Verfügung, die im Folgenden aufgelistet sind.

- substitutive Nomenklatur
- radikofunktionelle Nomenklatur
- additive Nomenklatur
- substraktive Nomenklatur
- konjunktive Nomenklatur
- Austausch-Nomenklatur („a“-Nomenklatur)
- Nomenklatur von Verbänden aus gleichen Einheiten, die über bi- oder multivalente Radikale verknüpft sind

4.1 Substitutive Nomenklatur

Die substitutive Nomenklatur stellt wohl das wichtigste Nomenklatorsystem zur Benennung funktionalisierter Verbindungen dar und zeichnet sich dadurch aus, daß der Ersatz (die Substitution) von Wasserstoff-Atomen in Stammverbindungen durch charakteristische (funktionelle) Gruppen nomenklatorisch wiedergegeben wird.

4.1.1 Charakteristische Gruppen

Man unterscheidet prinzipiell **zwei Arten von charakteristischen Gruppen**; solche, die ausschließlich als **Präfixe**, und andere, die als **Suffixe oder Präfixe** bezeichnet werden.

4.1.1.1 Charakteristische Gruppen, die nur als Präfixe bezeichnet werden

Die nachstehend aufgelisteten charakteristischen Gruppen werden ausschließlich als Präfixe bezeichnet und der Stammverbindung in alphabetischer Reihenfolge vorangestellt.

Die folgende Aufstellung stellt eine Auswahl der wichtigsten Gruppen und ihrer Präfixe dar, von denen die in Arzneistoffen häufig vorkommenden fett hervorgehoben sind.

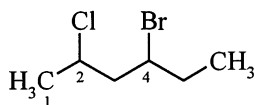
Charakteristische Gruppe	Präfix
–N ₃	Azido-
– Br	Brom-
– Cl	Chlor-
=N ₂	Diazo-
– F	Fluor-
– I	Iod-

-NO ₂	Nitro-
-NO	Nitroso-
RO-	Alkoxy-*
RS-	Alkylthio-

* Bei der Bezeichnung von „Alkyloxyresten“ (RO-) wird die Endung -yl des Alkylrestes weggelassen, sodaß z.B. ein CH₃O-Rest nicht Methyloxy-, sondern Methoxybenannt wird.

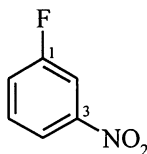
Die Bezifferung erfolgt in der Weise, daß die Präfixe insgesamt das niedrigstmögliche Set erhalten (*Beispiel 6*), bei gleichem Set jedoch das alphabetisch erstgeordnete Präfix mit dem niedrigsten Locanten versehen wird (*Beispiel 7*).

Beispiel 6:



4-Brom-2-chlorhexan

Beispiel 7:



1-Fluor-3-nitrobenzol

4.1.1.2 Charakteristische Gruppen, die als Suffixe oder Präfixe bezeichnet werden

Verbindungen, die charakteristische Gruppen enthalten, welche als Suffix oder als Präfix benannt werden können, werden in der Weise nomenklirt, daß die **ranghöchste Gruppe als Suffix** bezeichnet werden muß (sie definiert auch die **Verbindungsklasse**), während alle anderen funktionellen Gruppen als Präfixe der Stammverbindung in alphabetischer Reihung vorangestellt werden.

Die folgende Aufstellung gibt eine Auswahl von Verbindungsklassen und ihren charakteristischen Gruppen, die als Suffix oder Präfix zu benennen sind, nach absteigender Priorität (als Suffix) geordnet wieder. Auch hier sind die für die Benennung von Arzneistoffen besonders relevanten Nomenklaturelemente fett hervorgehoben.

Verbindungsklasse	Gruppe	Präfix	Suffix
Kationen	-N ⁺ R ₃	ammonio-	-ammonium
Carbonsäuren	-COOH	Carboxy-	-carbonsäure
	-(C)OOH*		-säure
Sulfonsäuren	-SO₃H	Sulfo-	-sulfonsäure
Salze	-COOM		Metall....carboxylat
	-(C)OOM*		Metall....oat
Ester	-COOR	R-oxycarbonyl-	R....carboxylat
	-(C)OOR*		(-carbonsäure-R-ester)
			R....oat
			(-säure-R-ester)
Säurehalogenide	-COX	Halogenformyl-	-carbonylhalogenid
	-(C)OX*		-oylhalogenid
Amide	-CONH₂	Carbamoyl-	-carboxamid

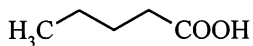
Verbindungs-klasse	Gruppe	Präfix	Suffix
Amidine	$-(\text{C})\text{ONH}_2^*$	Amidino-	-amid
	$-\text{C}(=\text{NH})\text{NH}_2$		-carboxamidin
	$-(\text{C})(=\text{NH})\text{NH}_2^*$		-amidin
Sulfonsäureamid	$-\text{SO}_2\text{NH}_2$	Sulfamoyl-	-sulfonamid
Nitrile	$-\text{CN}$	Cyano-	-carbonitril
Aldehyde	$-(\text{C})\text{N}^*$	Formyl-	-nitril
	$-\text{CHO}$		-carbaldehyd
	$-(\text{C})\text{HO}^*$		-al
Thioaldehyde	$-\text{CHS}$	Thioformyl-	-carbothialdehyd
	$-(\text{C})\text{HS}^*$	Thioxo-	-thial
	$>(\text{C})=\text{O}^*$	Oxo-	-on
Thioketone	$>(\text{C})=\text{S}^*$	Thioxo-	-thion
Acetale	$>(\text{C})(\text{OR})_2^*$	Di(Alkoxy)	-al(-on)di-R-acetal
Oxime	$>(\text{C})=\text{NOH}^*$	Hydroximino	-al(-on)oxim
Alkohole	$-\text{OH}$	Hydroxy-	-ol
Phenole	$-\text{OH}$	Hydroxy-	-ol
Thiole	$-\text{SH}$	Mercapto-	-thiol
Amine	$-\text{NH}_2$	Amino-	-amin
Imine	$=\text{NH}$	Imino-	-imin

* Die in Klammern stehenden C-Atome gehören zur Stammverbindung und nicht zum Suffix oder Präfix.

Damit stehen für Carbonsäuren und ihre Derivate sowie für Aldehyde zwei Suffixe zur Verfügung, die folgendermaßen zur Anwendung kommen:

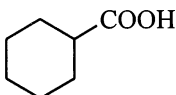
Prinzipiell soll die Stammverbindung möglichst viele C-Atome umfassen, d.h. auch das C-Atom der funktionellen Gruppe. Das ist in *Beispiel 8*, in dem die Stammverbindung 5 C-Atome besitzt und das C-1 als Carbonsäurefunktion ausgebildet ist, der Fall. Da die gesamte C-Anzahl bereits mit dem Namen Pentan erfaßt ist, wird mit dem entsprechenden Suffix (-säure) nur mehr die Funktionalität ausgedrückt. In *Beispiel 9*, in welchem ein Cyclohexanring die Stammverbindung darstellt, kann das C-Atom der Carboxylfunktion **nicht** in den Grundkörper integriert werden, sodaß dieses C-Atom mit dem Suffix (-carbonsäure) mitgenannt werden muß.

Beispiel 8:



Pentansäure

Beispiel 9:



Cyclohexancarbonsäure

4.1.2 Anleitung zur Namenskonstruktion substituierter Verbindungen

Zur Konstruktion der Nomenklatur substituierter Verbindungen wird prinzipiell nach den folgenden Punkten vorgegangen:

1. Suche nach der Hauptgruppe (Suffix)