

ANGEWANDTE CHEMIE

HERAUSGEGEBEN IM AUFTRAGE DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

61. Jahrgang · Nr. 11 · Seite 429—464 · November 1949

FORTSETZUNG DER ZEITSCHRIFT »DIE CHEMIE«

Die Genfer Nomenklatur in Chiffren und ihre Erweiterung auf Ringverbindungen (Auszug¹⁾).

Von Dr. W. GRUBER, Burghausen/Obb.

Es wird in Anlehnung an die Genfer Nomenklatur eine für alle Kohlenstoffverbindungen geltende neue Klassifizierung sowie Benennung und zur einfachen Registrierung eine entsprechende Chiffrierung vorgeschlagen.

1892 stellte eine internationale Kommission von Chemikern Regeln für die Benennung und Registrierung organischer Verbindungen auf; sie sind als „Genfer Nomenklatur“ allgemein bekannt geworden. Nach dem 1. Weltkrieg griff die Internationale Chemische Union die Arbeit wieder auf. Neben Verbesserungen sollten (da sich die Genfer Nomenklatur nur mit den aliphatischen Ketten befaßte) Vorschläge für die Benennung und Registrierung von Ringverbindungen ausgearbeitet werden. 1930 kamen die in Lüttich einstimmig gefaßten Beschlüsse heraus²⁾. Trotz 8-jähriger Arbeit war der Erfolg recht bescheiden. Der von Patterson und Mitarbeitern stammende Ring-Index erschien in Deutschland überhaupt nicht³⁾.

Nach dem 2. Weltkrieg setzten im Ausland aufs neue starke Bemühungen ein, die Namensgebung der organischen Verbindungen und vor allem deren Registrierung zu vereinheitlichen und zu verbessern. Es wurden ständige Nomenklaturausschüsse eingesetzt, unter denen der amerikanische besonders regsam ist und laufend Vorschläge veröffentlicht. Darüber hinaus erschienen völlig neue Systeme von Dupont und Locquin (Frankreich), Taylor, Patterson (USA), Gordon, Dyson (England⁴⁾). Einen ganz neuen Weg beschritt letzterer bereits 1946 mit seinem Vorschlag, die Verbindungen zu chiffrieren und sie nach diesen Chiffren zu ordnen.

Deutschland stand bisher völlig abseits. Seit 1892 bzw. 1930 blieb hier alles beim Alten; nicht einmal die Genfer Nomenklatur hat sich allgemein eingeführt. Das bedeutet, daß jeder Chemiker seine Verbindungen nennen kann wie es ihm beliebt.

Zunächst mag es höchst überflüssig erscheinen, den vielen Vorschlägen, die im Ausland bereits gemacht worden sind, noch weitere folgen zu lassen.

Dupont, Taylor und Patterson befaßten sich jedoch nur mit der Benennung und Bezifferung von Ringverbindungen. Das System von Gordon betrifft wohl alle organischen und anorganischen Verbindungen, doch kommt es wegen der vielen Zeichen und der damit verbundenen Unübersichtlichkeit kaum in Frage. So ist z. B. die Chiffre für Anthracen: M4C³MC³M4C³X²MC³X⁴X⁵. Gordon meint zwar, jeder Chemiker könne sein System in einer Stunde erlernen, ohne Zweifel ist es aber recht umständlich.

Sehr gut ist das Dysonsche Chiffrierungssystem, das große Vorteile für die Kennzeichnung und Registrierung organischer Verbindungen gebracht hat, doch benutzt es viele neuartige Symbole und benötigt viele neue Regeln, die nicht leicht zu behalten sind. Demgegenüber werden im vorliegenden Sy-

stem fast ausschließlich die allen Chemikern geläufigen Symbole verwendet und es wird auch an den bekannten Regeln der Genfer Nomenklatur grundsätzlich festgehalten. Ein weiterer großer Vorteil ist, daß die Chiffren mit den Namen weitestgehend übereinstimmen.

Bei der ungeheuren Mannigfaltigkeit der organischen Chemie müssen die verschiedenen Verbindungen wie in der Botanik nach klaren Gesichtspunkten in Klassen, Hauptgruppen und Gruppen eingeteilt werden, um sie rasch registrieren und finden zu können. Jede Verbindung hat nun einen Stamm, der für die Registrierung maßgebend und nach bestimmten und einfachen Regeln leicht festzustellen ist.

Die organischen Verbindungen gliedern sich in drei Klassen: Klasse A: Verbindungen, die Ketten als Stamm haben, Klasse B: Verbindungen, die Ringe als Stamm haben, Klasse C: Verbindungen mit unbekannter Struktur. Diese werden entweder nach der Bruttosummenformel geordnet oder nach Trivialnamen.

Die Klassen A und B werden weiter in Hauptgruppen unterteilt:

- Klasse A: I. Kohlenstoff-Ketten,
II. Kohlenstoff-Ketten mit überwiegend OH-Gruppen (Zucker),
III. u. IV. Hetero-Ketten,
V. Ester anorganischer Säuren.
Klasse B: I. Reine Kohlenstoff-Ringe,
II. u. III. Heterocyclische Ringe,
IV. Anorganische Ringverbindungen mit organischen Seitenketten.

Durch diese Unterteilung ist das Finden der Verbindungen sehr erleichtert. Je komplizierter eine Verbindung aufgebaut ist, desto leichter ist sie zu finden, da die Zahl der in Frage kommenden Verbindungen mit der Kettenlänge bzw. Ringzahl rasch abnimmt.

So außerordentlich praktisch und wichtig Trivialnamen sind, so ist eine rationelle Registrierung nur möglich, wenn die Struktur der Verbindungen in Chiffren ausgedrückt wird, und zwar in Symbolen und Chiffren, die jeder sofort versteht.

Klasse A Kettenverbindungen

A I. Kohlenwasserstoff-Ketten

Für die gesättigten Kohlenwasserstoff-Ketten gelten die Symbole, die bereits Richter in seinem System verwendete. Der Wasserstoff wird dabei nicht mitgenannt: Methan ist C, Äthan C₂, Propan C₃ usw.

Mehrfachbindungen haben die Symbole = und Äthylen ist C₂=; Acetylen C₂≡; Butadien C₄.1,3=; Vinyl-acetylen C₄.=,3=.

Was in diesen Chiffren vor dem (ersten) Punkt steht, ist Stamm.

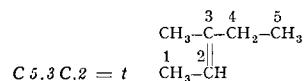
¹⁾ Die ausführliche Arbeit erscheint als Beiheft Nr. 58 dieser Zeitschrift. Umfang 72 Seiten, kartoniert DM 4.50. Zu beziehen vom Verlag Chemie, GmbH., Weinheim/Bergstraße, Hauptstraße 127.

²⁾ Ber. dtsch. chem. Ges. 65, I, 13 [1932].

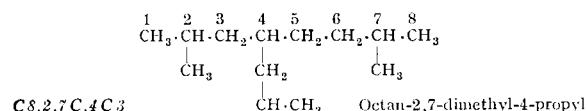
³⁾ Veröffentlicht in Chem. Abstracts 1945.

⁴⁾ G. Malcolm Dyson: A New Notation and Enumeration System for Organic Compounds. Longmans Green and Co, London.

Die Cis-trans-Isomerie wird durch die kleinen Buchstaben *c* und *t* nach = ausgedrückt.



Verzweigte Ketten werden wie folgt chiffriert:

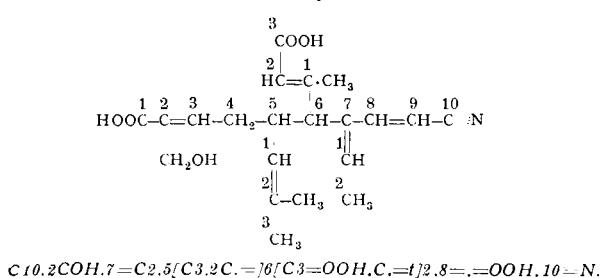


Die funktionellen Gruppen werden in gewohnter Weise geschrieben, also:

OH für ol, *=O* für al und on, *=OOH* für Säure, *SH* für thiol, *=S* für thial und thion, *=SSH* für Thion-Thiolsäure. *N* für *NH₂* amin, *=ON* für *ONH₂* amid, *=NOH* für Hydroxylamin, *=NOH* für Oxim, *=N* für nitril, *Cl* für Chlor, *EO* für epoxy

Ein ausführliches Verzeichnis der Symbole enthält das Beiheft. Äthanol ist demnach *C2.OH*, Propan-2-on(Aceton) *C3.2=O*, Hexan-1,6-disäure (Adipinsäure) *C6.1,6=OOH*, Butanamin *C4.N*, Propan-2-oxim (Acetoxim) *C3.2=NOH*, Propen-3-nitril (Acrylnitril) *C3.=3=N*.

Schema eines Kettenkomplexes.



Wenn eine Ortszahl fehlt, ist stets 1 zu setzen.

Decan-2-methylol-7-enäthyl-5-propenyl-2-metho-6-propylsäure-1-en-trans-1-metho-2,8-dien-1-säure-10-nitril.

Die Reihenfolge der Chiffrierung ist streng einzuhalten, da die Registrierung nach der Chiffre erfolgt:

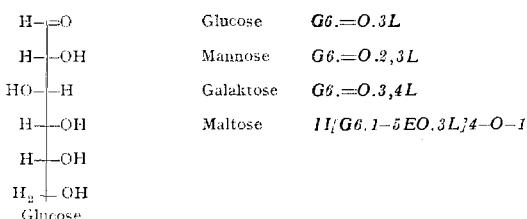
- längste Kette ist Stamm,
- Benennung der Seitenketten von der kürzesten und einfachsten ansteigend,
- Mehrfachbindungen,
- funktionelle Gruppen und Substituenten.

Zusammengehöriges steht in [],

e) die Seitenketten werden von der Anknüpfungsstelle mit der Hauptkette an mit 1 bezeichnet.

A II. „G“ Verbindungen

Gesättigte Kohlenwasserstoffe, in welchen die meisten Kettenglieder OH-Gruppen tragen, heißen „G“ (Glucose)-Verbindungen und erhalten das Symbol „G“.



Beispiele für Stärke, Stachyose und andere G-Verbindungen bringt § 18 des Beiheftes.

A III. Heteroketten mit O-S-N-Atomen in der Kette

Die Hetero-Ketten (Z-Verbindungen) werden genau nach den Regeln der Kohlenwasserstoff-Ketten chiffriert. Die Chiffren beginnen jedoch mit Z statt mit C.

Der Äthylpropyläther, der nach der Genfer Nomenklatur Äthanoxypropan heißt, hat die Chiffre *Z6[C2OC3]*. Z bedeutet Hetero-Verbindung, d. h. es wird durchnumeriert. 6 gibt die Gliederzahl für die Registrierung an. Die Verbindung ist im Register unter *Z6(O)* zu finden. Diäthylenglykol hat die Chiffre: *Z5[C2OC2.1,5OH]*.

An die Stelle von Sauerstoff können auch S und N treten. Triäthylamin *Z5[C2N(C2)C2]*.

Atome, die nicht Kettenglieder sind, werden in () Klammern gesetzt.

Äthan-amid-äthan *Z5[C2(=O)NC2]*

A IV. Hetero-Ketten mit anderen Heteroatomen als O, S, N. § 32.

z. B. Silicone $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2 \quad Z3[CSi(IIIC)C]$

A V. (E) Ester anorganischer Säuren.

Schwefelsäure-diäthylester $\text{S=O}_2, II[OC2]$

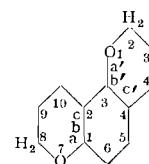
Weitere Beispiele siehe § 33⁵⁾.

Klasse B Ringverbindungen.

Wie bei den Kettenverbindungen wird auch bei den Ringverbindungen von einem Stammring bzw. Stammringkomplex ausgegangen.

Ein ganz großer Vorteil des vorliegenden Systems ist die völlige Einheitlichkeit der Bezeichnung der Ringverbindungen.

Man vergleiche die Bezeichnung von Anthracen, Inden, Purin, Sterin, Triterpen, Yohimbin, Phorphyrin, ferner das Patterson-System mit Ziffern und Buchstaben und schließlich den neuesten Vorschlag⁶⁾ für die Bezeichnung folgender Verbindung.



2H, 8H-Benzol[1,2-b,3,4-b']dipyran.

Nach dem vorliegenden System wird der Stamm (wie bei den Bicyclen), von einem Kondensationspunkt ausgehend, stets durchnumeriert. Die anellierten Nebenringe werden dann im gleichen Sinn weiterbezeichnet.

B I Kohlenstoff-Ringverbindungen.

Die Chiffren sind wiederum höchst einfach.

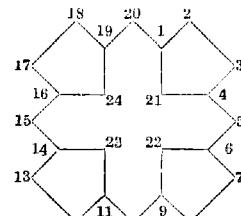
Die Größe der Ringe wird durch arabische Zahlen, die Anzahl der Ringe durch römische Zahlen ausgedrückt und der Sättigungsgrad durch das Präfix *~*.

Benzol *6*; Naphthalin *116*; Anthracen *III16*; Inden *56*; Cyclohexan *6*; Cyclooctan *8*; Cyclo-octa-tetraen *8*; Phenanthren *aIII16*. (*a* = angulus = gewinkelte Achse).

Phenol *6JOH*; Hydrochinon *6J1,4OH*; Anilin *6JN*.

Was in den Chiffren der Ringverbindungen vor der J steht, ist Stamm. Die Stämme werden eingeteilt in einige wenige „konventionelle“ Ringkomplexe, in nichtkonventionelle Ringkomplexe und in Einzelringe.

Die konventionellen Ringkomplexe sind das Naphthalin *116*, das Anthracen *III16*, das Naphthacen *IV6* und alle weiteren 6er Ringkomplexe auf gerader Achse; weiter das Phenanthren *aIII16* und das Inden *56*. Alle übrigen Ringkomplexe gelten als nichtkonventionell. In diesen ist der Ring mit der größtmöglichen Gliederzahl Stamm. z. B.



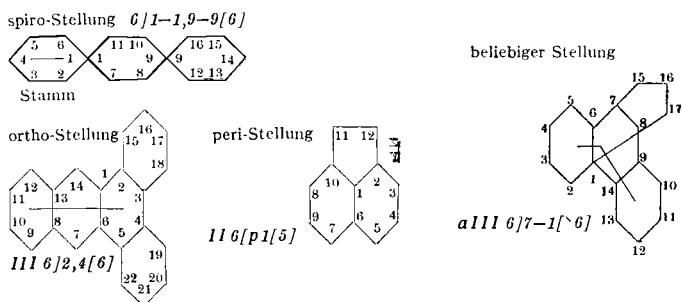
20/1-4, 6-9, 11-14, 16-19/3

Enthält eine Verbindung nur einen Ring, so ist dieser Stamm. Bei der ungeheuren Vielgestaltigkeit der Ringverbindungen ist eine klare Einteilung in Stamm, Nebenringe und Seitenringe nötig.

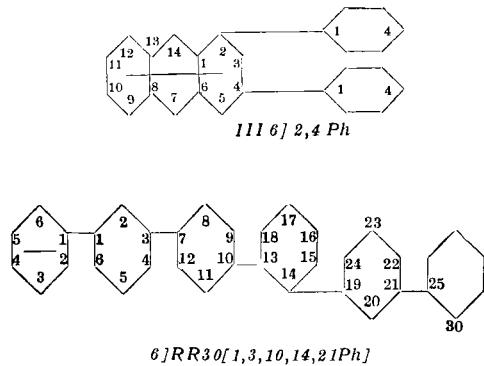
⁵⁾ Die §§ beziehen sich auf die entsprechenden Abschnitte im Beiheft.

⁶⁾ Vorschlag der Council of the American Chem. Soc. May 2, 1949.

Nebenringe sind Ringe, die mit dem Stamm Glieder gemeinsam haben. Diese können mit dem Stamm in verschiedener Weise kondensiert sein, und zwar in spiro-, ortho-, peri- oder beliebiger Stellung.

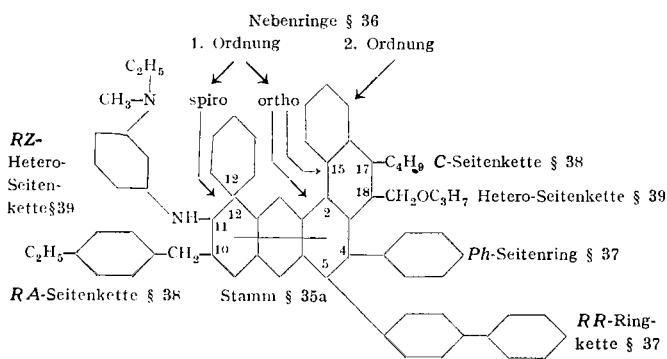


Seitenringe sind Ringe, die mit dem Stamm und seinen Nebenringen keine Glieder gemeinsam haben (Phenyl, Biphenyl etc.). Sie erhalten das Präfix RR bzw. die Symbole R, U, Ph (R = gesättigte, U = ungesättigte Ringe, Ph = Phenyl).



Kohlenstoff-Seiten-Ketten, die Ringe enthalten, haben das Präfix RA und Heteroketten mit Ringen das Präfix RZ.

Folgende schematische Verbindung zeigt die genannten Möglichkeiten.



B II. Ringverbindungen mit den Heteroatomen N, O, S § 55.

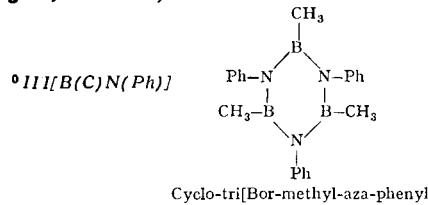
Sind ein oder mehrere Kohlenstoffglieder der Ringe durch andere Atome, z. B. N, O, S, ersetzt, so ändern sich grundsätzlich weder die Chiffren noch die Namen der Ringverbindungen; es werden nur die Symbole der Heteroatome, z. B. ZN, ZO, ZS (aza, oxa, thia), angefügt.

Auf diese Weise ist es möglich, alle organischen Ring- und Kettenverbindungen, selbst die kompliziertesten, rationell zu chiffrieren und zu registrieren, z. B.: Acridin 1116j7ZN.

Chiffren für Morphin, Vomicin, Cozymase usw. siehe § 64 des Beiheftes.

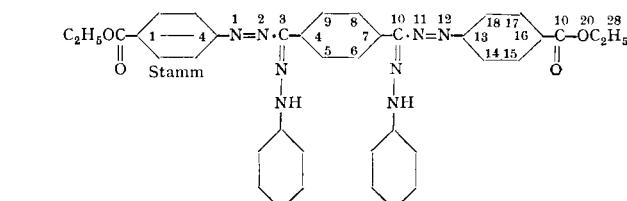
B III. Ringverbindungen mit anderen Heteroatomen als N, O, S § 56 z. B. Metall-Komplexverbindungen.

B IV. Ringverbindungen ohne Kohlenstoffatome im Ring § 60, Siloxane, Borazole.



Nach kurzer Einarbeitung wird bereits offenbar, daß eine komplizierte Verbindung viel leichter zu chiffrieren, als nach den bisherigen Regeln zu benennen ist.

Es ist z. B. nicht einfach, für eine Verbindung mit dem Namen N,N''-Diphenyl-N',N'''-bis-(4carbäthoxy-phenyl)-C,C'-phenylen-diformazan die Strukturformel mühelos und zweifelsfrei abzuleiten. Leicht gelingt dies dagegen nach der Chiffre:



Benennung

Wünschenswert wäre eine einheitliche Benennung in der ganzen Welt. Dieser Wunsch kann nur in Erfüllung gehen, wenn die Namen der Verbindungen rationell und kurz sind und mit den Chiffren weitestgehend übereinstimmen. Bei den Kettenverbindungen ist dieser Wunsch durch die Namen der Genfer Nomenklatur bereits im weitestem Maß erfüllt, für die Ringverbindungen werden in § 65 entsprechende Vorschläge gebracht. Es genügen 3 bis 4 Silben für ganze Ringkomplexe, z. B.

116j	Di-sex-an	Decahydro-naphthalin
1116j	Tri-sex-in	Anthracen
56j	Pen-sex-in	Inden
8j	Ocin	Cyclo-octatetraen.

Selbstverständlich sollen durch dieses System die Trivialnamen nicht abgeschafft werden. Es ist im Gegenteil ein verstärkter Gebrauch zu wünschen, doch sollte man mehr rationelle „Gruppen-Trivialnamen“ einführen und nicht für jede noch so kleine Änderung (Umstellung einer OH-Gruppe usw.) einen neuen Namen erfinden.

Vorteile des Chiffriersystems

1. Es gibt für jede Verbindung nur eine mögliche Chiffre. Diese ist aus der Strukturformel leicht ableitbar und noch viel bequemer in sie zurückzuverwandeln. Sie ist linear und besteht nur aus Buchstaben, Ziffern und einigen wenigen, aber höchst bedeutsamen Interpunktionen gebräuchlichster Art.
2. Die Verbindungen sind entsprechend ihren Chiffren im Register geordnet, sie können also von ungelerten Hilfskräften ohne Schwierigkeit eingeordnet und gesucht werden; bei Übertragung der Chiffre auf Lochkarten können sie mechanisch verarbeitet und nach den verschiedenen Gesichtspunkten maschinell sortiert werden.
3. Da die Verbindungen nach dem Strukturbild aufgebaut sind, findet der Chemiker, der z. B. die Struktur von Morphin vor sich sieht, nach der Ringgröße und Ringzahl und den Heteroatomen im Register unter BII (Heterocyclen) 51V6JZN.ZO sehr rasch nicht nur das Morphin, sondern auch dessen Derivate. Das Vomicin und dessen Derivate würde er unter BII/5, 1116,7,9j 1IZN.ZO finden, also ein 5er Ring, drei 6er Ringe, ein 7er, ein 9er Ring.
4. Beibehaltung der Regeln der Genfer Nomenklatur.
Die Chemiker in und außerhalb Deutschlands werden nun gebeten, zu den Vorschlägen Stellung zu nehmen und Anregungen zu geben, damit endlich eine einheitliche Nomenklatur und Registrierung in der ganzen Welt zustande kommt.