

ANGEWANDTE CHEMIE

91. Jahrgang 1979
Heft 12
Seite 951–1032

Die Nodalnomenklatur – Allgemeine Prinzipien

Von Noël Lozac'h, Alan L. Goodson und Warren H. Powell^[*]

In diesem Aufsatz wird ein neues, umfassendes, auf Graphen basierendes und computergerechtes Nomenklatursystem für chemische Verbindungen vorgeschlagen. Bei diesem System dient die Nodalnomenklatur zur Benennung eines Graphen, der aus der Struktur einer Verbindung unter Vernachlässigung chemischer Details wie Identität der Atome, Art der Bindungen, Art und Anzahl von Ladungen etc. hergeleitet wurde. Nachdem der zugrundeliegende Graph benannt ist, wird sein Name modifiziert und ergänzt, um die chemischen Details einzuführen. Obwohl die Entwicklung der Nodalnomenklatur durch Probleme beim Benennen einiger organischer Systeme ausgelöst wurde, ist sie nicht auf organische Verbindungen beschränkt. In diesem Aufsatz werden nur allgemeine Prinzipien zur Benennung von Graphen beschrieben; die Anwendung auf spezifische Verbindungen wird in zukünftigen Beiträgen diskutiert werden.

1. Vorwort

Der hier vorgelegte Beitrag geht auf eine Anregung eines von uns (N. L.) zurück, die er 1973 während der Tagung der Commission on the Nomenclature of Organic Chemistry (CNOC) der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) gab. Es zeigte sich bald, daß dieses Konzept, das als Basis für die Benennung der als „Cyclophane“ bekannten Verbindungsklasse gedacht war, einen sehr viel weiteren Anwendungsbereich hat: Er erstreckt sich sogar über die Grenzen der organischen Chemie hinaus.

Unabhängig davon wurde 1972 als Teil der ständigen Überprüfung von Nomenklaturverfahren beim Chemical Abstracts Service (CAS) eine Studie zur Ringnomenklatur begonnen, die den Anstoß gab, ein allgemeines, auf Graphen basierendes Nomenklatursystem zu schaffen.

Als sich 1975 auf der Tagung der CNOC herausstellte, daß sich das neue CAS-System und die Nodalnomenklatur nach sehr ähnlichen Prinzipien entwickelten, wurde der Ausbau der Nodalnomenklatur gemeinsam fortgesetzt.

Die chemische Nomenklatur ist recht planlos gewachsen, weil sie sich parallel zum Fortschritt der Chemie entwickelt hat. Die Nomenklaturprinzipien wurden dabei nicht von Anfang an nach einem klaren und umfassenden Plan festgelegt; das Resultat ist eine Mixtur von Nomenklatursystemen mit überlappenden Regeln, Ungereimtheiten und unangemessener Behandlung einiger Verbindungsklassen. Eine umfangreiche Sammlung von Regeln für die Nomenklatur organischer Verbindungen ist publiziert worden^[1–4]. In diesen Regeln werden vor allem die allgemein angewendeten Praktiken kodifiziert, soweit sie für sinnvoll gehalten wurden.

Hauptziel der CNOC ist es jetzt, dieses bestehende System der organischen Nomenklatur auszubauen. Dementsprechend befaßt sich die CNOC mit der Überarbeitung der Regeln, hauptsächlich durch Vereinfachung, Systematisierung und Ausweitung, soweit erforderlich; die revidierten Regeln sollen veröffentlicht werden^[5].

Die Nodalnomenklatur wird nicht in den revidierten Regeln enthalten sein, da dies der geltenden CNOC-Politik widersprechen würde, bestehende Nomenklaturpraktiken zu kodifizieren und deren Anwendung zu empfehlen. Die CNOC hat jedoch das Potential der Nodalnomenklatur erkannt und die Publikation der grundlegenden Prinzipien und einiger Hinweise zu ihrer Anwendung empfohlen. Dies wird es ermöglichen, die Nodalnomenklatur dort zu benutzen, wo die üblichen Nomenklatursysteme sich als schwierig, umständlich oder nicht adäquat erweisen. Die erworbene Er-

[*] Prof. Dr. N. Lozac'h [+]
Institut des Sciences de la Matière et du Rayonnement
Université de Caen
F-14032 Caen Cedex (Frankreich)
Dr. A. L. Goodson, Dr. W. H. Powell
Chemical Abstracts Service
P. O. Box 3012, Columbus, Ohio 43210 (USA)
[+] Korrespondenzautor.

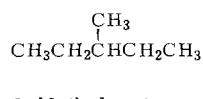
fahrung wird konstruktive Kritik ermöglichen und zur Lenkung der weiteren Entwicklung beitragen. Wir halten die Nodalnomenklatur noch nicht für vollständig entwickelt und gehen davon aus, daß einige kleinere Modifikationen erforderlich oder wünschenswert sein werden, bevor die CNOC die Assimilierung an das IUPAC-System der organischen Nomenklatur in Erwägung zieht.

Wir haben uns sehr bemüht, dafür zu sorgen, daß die Nodalnomenklatur sowohl mit den bestehenden Nomenklatursystemen als auch mit den vorgeschlagenen revidierten Regeln vereinbar ist, damit sie so breit wie möglich angewendet werden kann. Einige traditionelle Praktiken der gegenwärtigen Nomenklatursysteme brauchen demnach nicht aufgegeben zu werden.

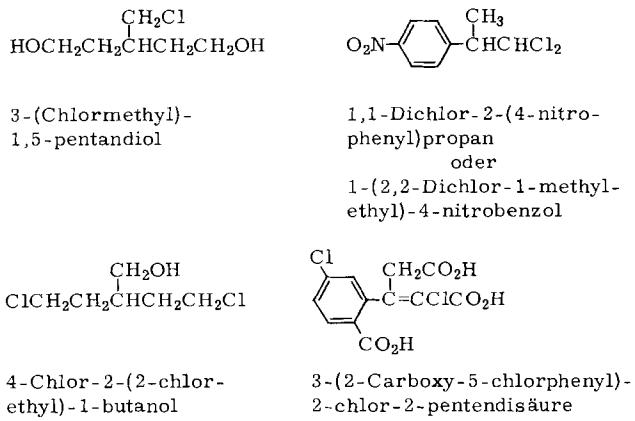
Eines der wichtigsten Merkmale der Nodalnomenklatur ist das umfassende Konzept zur systematischen Benennung von Strukturgraphen, das hier zum ersten Mal eingeführt worden ist, wenn sich auch zahlreiche frühere Publikationen mit Strukturgraphen als Hilfe zur Beschreibung von Ringsystemen befassen. Das System ist computergerecht. Außerdem lassen sich die resultierenden Namen leicht für die Beschreibung tatsächlicher chemischer Verbindungen modifizieren. In diesem Beitrag werden mehrfach komplexe Beispiele mit langen systematischen Namen gewählt, um den weiten Anwendungsbereich und die leichte Anwendbarkeit der Nodalnomenklatur zu demonstrieren. Es sei jedoch betont, daß die Nodalnomenklatur nicht entwickelt worden ist, um damit nur ungewöhnliche oder komplexe Strukturen zu benennen: Sie ist ein wahrhaft allgemein anwendbares System. Strukturen, die sich mit traditionellen Nomenklatursystemen leicht benennen lassen, können mit der Nodalnomenklatur ebenso leicht benannt werden, wobei sich noch zusätzliche Vorteile ergeben.

2. Einführung

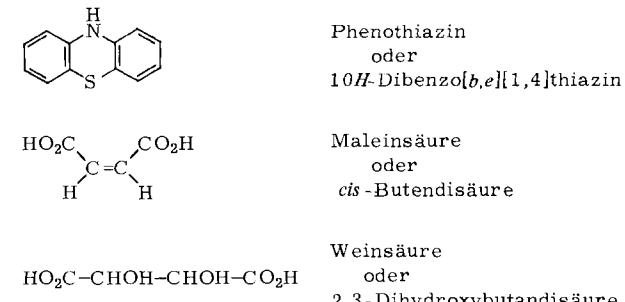
Die Entwicklung der Nodalnomenklatur wurde durch die Erkenntnis veranlaßt, daß die bestehenden Systeme für die Nomenklatur organischer Verbindungen gewisse Mängel aufweisen. Die meisten dieser Unzulänglichkeiten kommen in der einen oder anderen Weise dadurch zustande, daß selbst recht einfache Strukturen wie Kohlenwasserstoffe oft unter Anwendung substitutiver Prinzipien beschrieben werden müssen, zum Beispiel:



Konsequenzen des Gebrauchs substitutiver Prinzipien sind u. a.: a) Die Namen einfacher Strukturen der oben gezeigten Art werden stark oder sogar vollständig verändert, wenn die Verbindungen durch charakteristische Gruppen substituiert sind, b) mehrfach vorkommende charakteristische Gruppen sind oft über den ganzen Namen verstreut, und c) nicht jedem Skelettatom der Verbindung läßt sich ein eindeutiger Lokant zuordnen. Die Punkte a) bis c) können durch die folgenden Derivate der oben gezeigten Kohlenwasserstoffe illustriert werden.



Diese Probleme werden in der traditionellen organischen Nomenklatur manchmal durch den Gebrauch von Trivialnamen vermieden, d. h. von einfachen Namen, die für größere Struktureinheiten gelten; gewöhnlich ist dabei die komplette eindeutige Numerierung und häufig die Stereochemie festgelegt. Solche Trivialnamen koexistieren mit systematischen Namen, welche üblicherweise länger sind, weil sie meistens aus den Bezeichnungen für kleinere Struktureinheiten zusammengesetzt sind. Die folgenden Beispiele illustrieren diese Situation.



Die Nodalnomenklatur beschreibt den Graphen einer Verbindung und vermeidet die genannten Unzulänglichkeiten dadurch, daß sie jeder Position in der Struktur einen eindeutigen Lokanten zuordnet (siehe Abschnitt 3). Substitutive Prinzipien sind zur Beschreibung des Graphen einer Verbindung nicht erforderlich, können aber angewendet werden, um charakteristische Gruppen in den Namen spezifischer Verbindungen anzulegen. Dies wird in späteren Beiträgen diskutiert werden.

3. Allgemeine Konzepte der Nodalnomenklatur

Die grundlegende Logik der Nodalnomenklatur beruht auf der Beschreibung einer Struktur in Form ihres Graphen. Der Begriff „Nodus“^[6] stammt aus dem Lateinischen und bedeutet Knoten, Beule oder Schnittpunkt von Zweigen. Der Begriff wird auf einzelne Skeletteinheiten einer Struktur, das heißt Atome, angewendet. Er kann ebenfalls auf Gruppen von Atomen angewendet werden, die wichtige Struktureinheiten bilden, z. B. einen Benzolring in einem Cyclophan, ein Aminosäure-Fragment in einem Polypeptid oder HOP(O)O in Triphosphorsäure $\text{H}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$. Nodi, die solchen Atomgruppen entsprechen, werden Kontraktionsnodi genannt.

Die *allgemeine Nodalnomenklatur*, das Thema dieses Aufsatzen, beschreibt Numerierung und Anordnungen von Nodi eines Graphen. Sie spezifiziert nicht die Natur der Nodi. Die

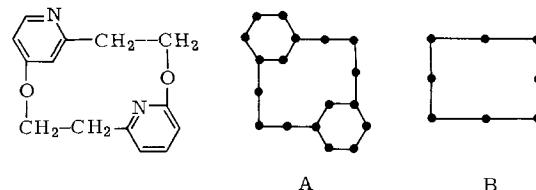
spezielle Nodalnomenklatur beschreibt dagegen die Natur oder Struktur der Nodi, spezifiziert die Bindungsverhältnisse zwischen den Nodi etc. Sie wird in späteren Publikationen diskutiert werden.

Da das Graphen-Konzept zur Benennung und Numerierung^[1] von Strukturen am bequemsten durch Graphen illustriert wird, die von organischen Strukturen abgeleitet sind, werden die Regeln der allgemeinen Nodalnomenklatur in diesem Beitrag häufig durch von Kohlenwasserstoffen und Heterocyclen abgeleitete Graphen veranschaulicht. Darüber hinaus benutzen wir das Suffix „-an“ (in Form von „Nodan“), das in der traditionellen organischen Nomenklatur gesättigte Strukturen anzeigt. Dies soll jedoch in keiner Weise implizieren, daß sich die Prinzipien der Nodalnomenklatur nicht gleichermaßen auf andere Verbindungstypen, z. B. Koordinationsverbindungen, anwenden lassen. Beispiele und Terminologie dieser Arbeit sollten weiterhin nicht einen grundlegenden Unterschied zwischen den Konzepten der klassischen organischen Nomenklatur und denen der Nodalnomenklatur verschleiern: In der klassischen organischen Nomenklatur besteht das Skelett normalerweise aus Atomen der üblichen nichtmetallischen Elemente (wie Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff), die definierte Bindigkeiten gemäß den klassischen Valenz-Betrachtungen haben. In der allgemeinen Nodalnomenklatur ist die Bindigkeit eines Nodus in keiner Weise beschränkt; ein Nodus kann daher eine beliebige Bindigkeit haben, welche erst in Erscheinung tritt, wenn seine Natur definiert ist.

Im Gegensatz zur klassischen organischen Nomenklatur sorgt die Nodalnomenklatur für einen eindeutigen numerischen Lokanten für jeden Nodus des Graphen. Dies kann auch in einigen speziellen Bereichen der traditionellen organischen Nomenklatur, so bei Steroiden und Alkaloiden, von Nutzen sein, wo Trivialnamen den systematischen Namen vorgezogen werden mögen. Ein Übermaß an Trivialnamen ist nicht wünschenswert; allerdings sind sie einfacher als systematische Namen und implizieren häufig ein erhebliches Ausmaß an stereochemischen Informationen. Recht störend ist es bei vielen Trivialnamen, daß die zugehörige Numerierung manchmal unvollständig und oft willkürlich ist und innerhalb derselben Klasse von Struktur zu Struktur variiert kann. Die Nodalnomenklatur bietet dagegen ein allgemeines Numerierungssystem an, das sich in Verbindung mit jedem Trivialnamen oder Nomenklatursystem benutzen läßt.

Bevor eine spezielle Verbindung nach der Nodalnomenklatur benannt werden kann, sind zwei Entscheidungen zu treffen. Erstens müssen diejenigen Bestandteile der Struktur bestimmt werden, auf welche die allgemeine Nodalnomenklatur nicht angewendet werden soll – und die deshalb als Substituenten behandelt werden müssen. Diese Wahl ist bei der allgemeisten Anwendung der Nodalnomenklatur nicht nötig, ist jedoch charakteristisch für die klassische organische Nomenklatur. Diese Möglichkeit ist hier mit einbezogen, denn wir wollen dafür sorgen, daß die allgemeine Nodalnomenklatur soweit wie möglich mit existierenden Nomenklatursystemen vereinbar ist (siehe Abschnitt 1). Zweitens muß die Natur der Nodi, die mit der Nodalnomenklatur benannt werden, bestimmt werden. Die allgemeine Nodalnomenklatur definiert nicht die Natur der Nodi; diese hängt

vom Verbindungstyp und dem Zusammenhang ab, in dem darüber berichtet wird. Um den Graphen gemäß den Prinzipien der allgemeinen Nodalnomenklatur zu benennen, ist es jedoch notwendig, die Natur der individuellen Nodi zu definieren. Die unten gezeigte Struktur z. B. läßt sich auf der Basis von Graph A oder B benennen. In A ist jeder Nodus ein Atom, in B wurden die Pyridinringe, um den Graph zu vereinfachen, jeweils zu einem einzigen Nodus (Kontraktionsnodus) verdichtet, wie dies für die Benennung von Cyclophanen vorgeschlagen worden ist^[7].



Nachdem der Graph definiert ist, wird die allgemeine Nodalnomenklatur angewendet, um Anordnung und Numerierung der Nodi zu beschreiben, was in diesem Beitrag im einzelnen gezeigt wird. In späteren Beiträgen wird diskutiert werden, wie anschließend die spezielle Nodalnomenklatur zur Beschreibung der Nodi, der Bindungsverhältnisse und der als Präfixe und/oder Suffixe ausgedrückten Substituenten benutzt wird.

Erst nachdem Nodi und Bindungen des Graphen spezifiziert worden sind, wird Wasserstoff gemäß den Bindigkeiten der Nodi angefügt, wie dies bei Anwendung der *substitutiven Nomenklatur* nötig ist. So wäre nach der allgemeinen Nodalnomenklatur der Graph von 3-Methylpentan (siehe Abschnitt 2) als [5.1³]Hexanodan zu benennen. In der speziellen (substitutiven) Nodalnomenklatur könnte dieser Stammkohlenwasserstoff gemäß den Regeln der Sektion G^[5] als [5.1³]Hexacarban oder, mehr traditionell, als [5.1³]Hexan bezeichnet werden. Das Siliciumanalogon könnte man [5.1³]Hexasilan nennen. Solche Stammhydride können wie in der klassischen organischen Nomenklatur durch charakteristische Gruppen substituiert sein, was zu Namen wie 5,6-Dichlor[5.1³]hexacarban-1-ol führt; nach den üblichen Regeln hat die Verbindung den Namen 5-Chlor-3-(chlormethyl)-1-pentanol.

Die vorstehende Diskussion zeigt, daß die Nodalnomenklatur viele Vorteile gegenüber der klassischen organischen Nomenklatur hat; dazu gehören:

- 1) konsistente Behandlung von Ketten und Ringen sowie von Verbänden aus Ketten und Ringen,
- 2) systematische Numerierung der Atome in komplexen Strukturen, wie sie verbreitet in Naturstoffen vorkommen, wobei solche Numerierungen gleichermaßen für mit Trivial- oder Halbtrivialnamen beschriebene Strukturen anwendbar sind,
- 3) Anwendbarkeit für Strukturen mit Nodi höherer Bindigkeit, wie sie z. B. in Koordinationsverbindungen vorkommen,
- 4) logische Beschreibung eines Verbandes aus Untereinheiten oder Modulen jedes beliebigen Typs oder Komplexitätsgrads, z. B. a) cyclische Systeme in Ringverbänden, Protophanen und Cyclophanen; b) Aminosäure-Fragmente in Polypeptiden und Proteinen; c) einkernige Struktureinheiten in mehrkernigen Polysäuren,
- 5) die Nomenklatur ist computergerecht.

[*] Anmerkung des Übersetzers: Unter „Numerierung“ wird hier die Zuordnung von Lokanten zu Nodi oder Skelettatomen (und von Modulrangzahlen zu Modulrangdeskriptoren) verstanden.

4. Glossar

Für die gebräuchlichen Begriffe der klassischen organischen Nomenklatur übernehmen wir die Definitionen aus den publizierten Regelwerken^[1-4]. Darüber hinaus werden in diesem Beitrag und den folgenden Beiträgen dieser Reihe Begriffe gebraucht, die eine neue oder spezielle Bedeutung haben. Diese Begriffe werden wie folgt definiert:

Allgemeine Nodalnomenklatur: Die Beschreibung und Numerierung der Anordnung von Nodi in einem Graphen.

Deskriptor:
[Descriptor]

Graph (Strukturgraph):
[Graph (Structure Graph)]

Hauptmodul:
[Principal Module]

Kontrahieren (eines Moduls):
[Contraction (of a Module)]

Kontraktionsnodus:
[Contraction node]

Modul:
[Module]

**Modulrangdeskriptor
(Rangdeskriptor):**
[Module Seniority Descriptor
(Seniority Descriptor)]

Modulranggraph (Ranggraph):
[Module Seniority Graph
(Seniority Graph)]

cher Reihenfolge die Module eines Verbandes numeriert werden.

Jedem Modulrangdeskriptor in einem Modulranggraph zugeordnete Nummer, die die Reihenfolge festlegt, in welcher den Modulen Lokanten zugeordnet werden.

Die einfachste Einheit eines Graphen, die entweder ein einzelnes Atom oder eine Gruppe von Atomen repräsentiert.

Das Modul oder eines der Module des höchsten Ranges in einem Verband.

Die Beschreibung und Numerierung einer chemischen Struktur, wobei der spezielle Nodalname durch Zufügen von Details wie der Natur der Nodi, der Bindungsverhältnisse, der Ladungen usw. zum allgemeinen Nodalnamen erhalten wird.

Diese Bezeichnung wird hauptsächlich benutzt, um zu sichern, daß chemischen Strukturen entsprechende Graphen nicht mit anderen Typen von Graphen verwechselt werden, z. B. Graphen, die Reaktionsssequenzen zugeordnet sind.

Ein Strukturgraph aus mehr als einem cyclischen Modul oder aus mindestens einem acyclischen und mindestens einem cyclischen Modul.

Modulrangzahl (Rangzahl):
[Module Seniority Number
(Seniority Number)]

Nodus^[6]:
[Node]

Ranghöchstes Modul:
[Senior Module]

Spezielle Nodalnomenklatur:
[Specific Nodal Nomenclature]

Strukturgraph (siehe Graph):
[Structure Graph]

Verband (von Modulen):
[Assembly (of Modules)]

5. Vorgeschlagene Regeln für die allgemeine Nodalnomenklatur

Regel N-1 – Acyclische Graphen

N-1.1. Ein acyclischer Graph besteht aus einer unverzweigten Kette von Nodi oder aus zwei oder mehr unverzweigten Ketten von Nodi, die miteinander verknüpft sind, ohne daß dabei eine cyclische Struktur entsteht. Unabhängig von seiner Komplexität ist ein acyclischer Graph niemals als Kombination separater Strukturbestandteile anzusehen^[9].

N-1.2. Die *Hauptkette* in einem acyclischen Graph ist die längste unverzweigte Kette von Nodi und wird zuerst von einem Ende zum anderen numeriert. Wenn ein acyclischer Graph zwei oder mehrere unverzweigte Ketten größter Länge enthält, ist die Hauptkette diejenige, an welche die längsten Zweige geknüpft sind (siehe **Regel N-1.3**). Die Haupt-

Kette wird so numeriert, daß die längsten Zweige möglichst niedrige Nummern erhalten. Bleibt eine Wahl, wird **Regel N-1.6** angewendet.

N-1.3. Zweige in einem acyclischen Graphen sind unverzweigte Ketten von Nodi, die an die Hauptkette oder an andere, längere Zweige geknüpft sind. Jeder Zweig wird von einem Ende zum anderen numeriert, immer mit dem Nodus beginnend, der an den bereits numerierten Teil des Graphen geknüpft ist.

N-1.4. Zweige in einem acyclischen Graphen werden nacheinander in der Reihenfolge abnehmender Länge numeriert. Wenn zwei oder mehr gleich lange Zweige vorhanden sind, wird jeweils zuerst der Zweig numeriert, der an den Nodus mit der niedrigsten Nummer in der Kette geknüpft ist.

N-1.5. Der *Deskriptor* eines acyclischen Graphen besteht aus eckigen Klammern, die folgendes einschließen: a) arabische Ziffern, die die Zahl der Nodi in der Hauptkette anzeigen, b) einen Punkt, gefolgt von arabischen Ziffern, die die Zahl der Nodi in jedem Zweig angeben, zitiert in der Reihenfolge ihrer Numerierung (siehe **Regel N-1.4**), und c) einen hochgestellten Lokanten nach jeder Zahl gemäß b), der den Nodus im bereits numerierten Teil des Graphen angeibt, an welchen der Zweig geknüpft ist^[10].

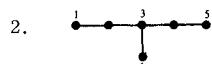
N-1.6. Wenn für einen acyclischen Graphen zwei oder mehr alternative *Deskriptoren* abgeleitet werden können, ist derjenige korrekt, der an der Stelle der ersten Abweichung die kleinere hochgestellte Zahl enthält, wenn diese Zahlen vom Anfang des Deskriptors an Term für Term verglichen werden^[11].

N-1.7. Der *Name* eines acyclischen Graphen besteht aus: a) dem nach **Regel N-1.5** abgeleiteten Deskriptor; b) einem multiplizierenden Präfix wie „di-“, „tri-“, „tetra-“ usw.^[12], das die Gesamtzahl der Nodi angibt, und c) der Endung „-nodan“^[13].

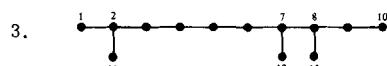
Beispiele^[14]:



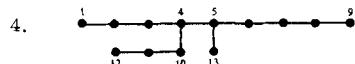
[6]Hexanodan



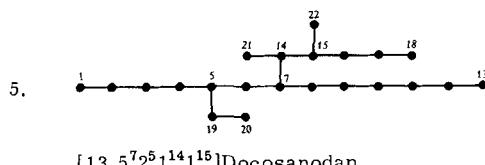
[5,1^3]Hexanodan



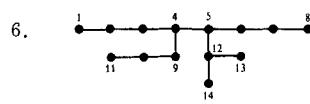
[10,1^21^71^8]Tridecanodan



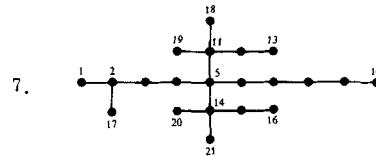
[9,3^41^5]Tridecanodan



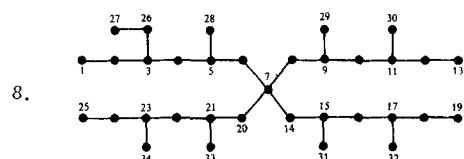
[13,5^72^51^41^5]Docosanodan



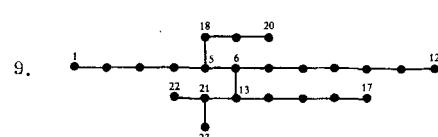
[8,3^42^51^12]Tetradecanodan



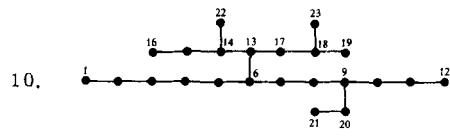
[10,3^53^51^21^111^111^141^14]Henicosanodan



[13,6^76^72^31^51^91^111^151^171^211^23]Tetratriacontanodan

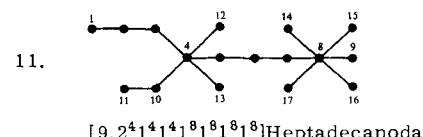


[12,5^63^52^131^21]Tricosanodan

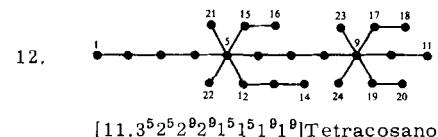


[12,4^63^132^91^141^18]Tricosanodan

Anmerkung: Der Deskriptor [12,4^63^132^91^151^17] ist nicht korrekt, weil die Lokantenserie 6,13,9,15,17 höher als 6,13,9,14,18 ist (**Regel N-1.6**).



[9,2^41^41^41^81^81^81^8]Heptadecanodan



[11,3^52^62^91^51^51^91^9]Tetracosanodan

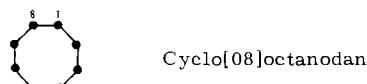
Regel N-2 – Monocyclische Graphen

N-2.1. Monocyclische Graphen werden von einem beliebigen Nodus aus fortlaufend in beliebiger Reihenfolge *numeriert*, bis alle Nodi numeriert sind.

N-2.2. Der *Deskriptor* eines monocyclischen Graphen besteht aus eckigen Klammern, die eine Null (die die Anwesenheit eines Rings anzeigt) und arabische Ziffern einschließen, die angeben, wieviele Nodi den Ring bilden.

N-2.3. Der *Name* eines monocyclischen Graphen besteht aus: a) dem kennzeichnenden Präfix „cyclo“, b) dem nach **Regel N-2.2** hergeleiteten Deskriptor, c) einem multiplizierenden Präfix, das die Anzahl der Nodi im Ring angibt^[12, 15], und d) der Endung „-nodan“^[13].

Beispiel:



Regel N-3 – Polycyclische Graphen^[1]

N-3.1. Ein *polycyclischer Graph* besteht aus einem monocyclischen Ring von Nodi und einer oder mehreren Brücken; darunter versteht man Ketten von Nodi, welche die Nodi des Hautrings und/oder anderer Brücken im polycyclischen System verbinden. Die Zahl der Nodi in den Brücken kann auch Null betragen.

N-3.2. Der *Hauptring* in einem monocyclischen Graph ist der größte monocyclische Ring.

Wenn zwei oder mehr monocyclische Ringe die gleiche Anzahl von Nodi haben, wird der Hauptring gemäß **Regel N-3.6** gewählt.

N-3.3. Die *Hauptbrücke* in einem polycyclischen Graph ist die längste Kette von Nodi, deren beide Enden an den Hautring geknüpft sind^[16]. Wenn der Graph zwei oder mehrere Ketten größerer Länge enthält, ist die Hauptbrücke gemäß **Regel N-3.6** zu wählen. Andere Brücken werden Nebenbrücken genannt.

N-3.4. Die *Numerierung* eines polycyclischen Graphen beginnt an einem der Nodi des Hautringes, an den die Hauptbrücke geknüpft ist (Brückenkopf), und schreitet in der Richtung fort, die dem anderen Brückenkopf den niedrigeren Lokanten zuteilt. Nach dem Hautring wird die Hauptbrücke fortlaufend numeriert; man beginnt mit dem Nodus der Hauptbrücke, der mit dem Nodus Nr. 1 des Hautrings verbunden ist. Die Nebenbrücken werden nacheinander in derselben Weise numeriert, wobei stets mit der längsten Brücke (oder einer von mehreren längsten Brücken) begonnen wird, die an bereits numerierte Nodi des Graphen geknüpft ist^[17]. Bleibt eine Wahl, wird zuerst diejenige Brücke numeriert, deren Brückenköpfe die niedrigsten Lokanten haben. Bei der Numerierung der Brücken beginnt man mit dem Nodus, der an den Brückenkopf mit dem niedrigeren Lokanten geknüpft ist.

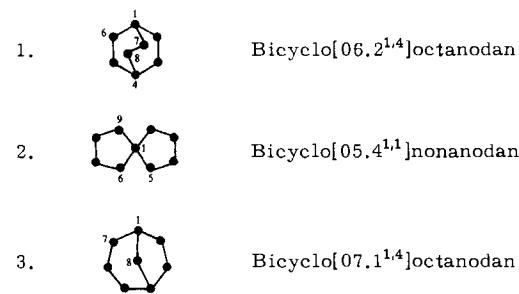
N-3.5. Der *Deskriptor* eines polycyclischen Graphen besteht aus eckigen Klammern, die folgendes einschließen: a) eine die Anwesenheit eines Ringes anzeigenende Null, gefolgt von arabischen Ziffern, die die Zahl der Nodi im Hautring anzeigen (siehe **Regel N-2.2**), b) einen Punkt, gefolgt von arabischen Ziffern, die die Zahl der Nodi in jeder Brücke angeben, zitiert in der Reihenfolge ihrer Numerierung (siehe **Regel N-3.4**), und c) nach jeder Zahl für die Brückenzahl ein Komma getrennte und in ansteigender

numerischer Ordnung zitierte hochgestellte Lokanten, die die Nodi im bereits numerierten Teil des polycyclischen Graphen anzeigen, an welche die Brücke geknüpft ist^[18].

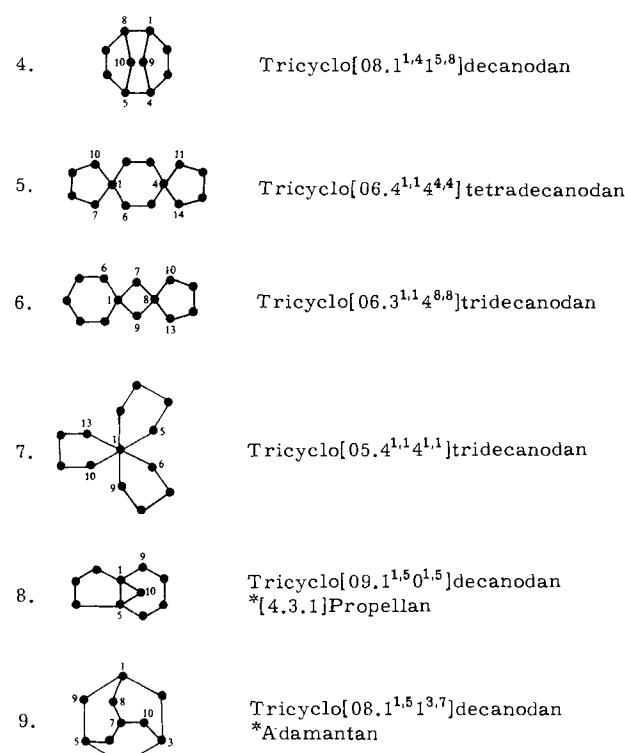
N-3.6. Wenn für einen polycyclischen Graph zwei oder mehr *alternative Deskriptoren* abgeleitet werden können, weil eine Wahlmöglichkeit für den Hautring, die Hauptbrücke, den Ausgangspunkt und/oder die Richtung der Numerierung besteht, ist derjenige korrekt, der an der Stelle der ersten Abweichung die höchste Zahl für die Brückenzahl oder die niedrigste hochgestellte Zahl für die Lokanten des Brückenkopfes enthält, wenn diese in der Reihenfolge ihres Auftretens vom Anfang des Deskriptors an Term für Term verglichen werden (siehe **Regel N-3.5**)^[19].

N-3.7. Der *Name* eines polycyclischen Graphen besteht aus: a) einem kennzeichnenden Präfix wie „bicyclo“, „tricyclo“ usw., das die Anzahl der Ringe im Ringsystem anzeigen^[20], b) dem nach den **Regeln N-3.5** und **N-3.6** hergeleiteten Deskriptor, c) einem multiplizierenden Präfix^[12], das die Gesamtzahl der Nodi angibt, und d) der Endung „-nodan“^[13].

Beispiele^[21]:



Anmerkung: Der Deskriptor [07.1^{1,5}] ist nicht korrekt, weil für die Hauptbrücke die Lokantenserie 1,5 höher als 1,4 ist (**Regel N-3.4**).



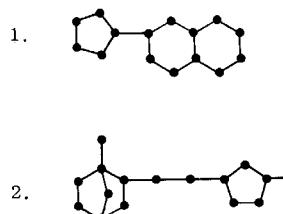
[*] In der Nodalnomenklatur können Phane als Mono- oder Polycyclen benannt werden.

10.		Tricyclo[09.2.1.5.1]dodecanodan
11.		Tetracyclo[010.1.4.2.11.11.0.5.10]tridecanodan
12.		Tetracyclo[010.3.1.1.1.3.5.0.4.8]tetradecanodan
13.		Tetracyclo[010.1.5.1.6.10.0.3.8]dodecanodan
14.		Pentacyclo[08.0.1.4.0.2.7.0.3.6.0.5.8]octanon *Cuban
15.		Pentacyclo[012.0.1.6.0.3.10.0.4.9.0.7.12]dodecanodan *Tetraasteran
16.		Pentacyclo[012.1.1.4.5.13.13.1.7.10.4.19.19]tricosanodan
17.		Hexacyclo[07.0.1.3.0.1.4.0.1.5.0.1.6.0.2.7]heptanodan
18.		Hexacyclo[05.2.1.1.2.2.2.3.3.2.4.4.2.5.5]pentadecanodan *[5]Rotan

Regel N-4. Verbände aus cyclischen und acyclischen Graphen

N-4.1. Ein Strukturgraph wird als *Verband* bezeichnet, wenn er aus mehr als einem cyclischen Modul oder aus mindestens einem acyclischen Modul und mindestens einem cyclischen Modul zusammengesetzt ist^[9].

Beispiele:



N-4.11. Ein *acyclisches Modul* ist ein Nodus oder eine verzweigte oder unverzweigte Kette von Nodi in einem Verband.

N-4.12. Ein *cyclisches Modul* ist der Graph eines Ringes oder Ringsystems in der konventionellen Bedeutung dieser Begriffe^[11]. Verbände von direkt verknüpften gleichen cyclischen Modulen, z. B. der Strukturgraph von Terphenyl, werden nicht als *ein Modul* betrachtet; jede Komponente wird als ein gesondertes cyclisches Modul angesehen.

N-4.2. Ein *Verbanddeskriptor* besteht aus eckigen Klammern, die folgendes einschließen: a) den in runde Klammern gesetzten Nodaldeskriptor des Hauptmoduls (des nach Regel N-4.3 bestimmten ranghöchsten Moduls oder eines der ranghöchsten Module gemäß den Regeln N-5.34 und N-5.4), b) die in runde Klammern gesetzten Nodaldeskriptoren der verbleibenden Module, die in der Reihenfolge der Numerierung gemäß den Regeln N-5.3 und N-5.4^[22] zitiert werden, und c) durch Doppelpunkte getrennte numerische Lokanten, die die Nodi anzeigen, durch welche jedes Modulpaar verbunden ist, wobei jeder Lokantensatz das passende Paar von Moduldeskriptoren verbindet.
Beispiel: [(06)1:7(4)10:11(05)]

N-4.21. Der *Deskriptor* jedes Moduls in einem Verband ist gleich dem Deskriptor des entsprechenden isolierten Graphen mit der Ausnahme, daß die eckigen Klammern durch runde Klammern ersetzt sind. Dementsprechend behält der Deskriptor die ursprüngliche Numerierung bei, d. h. die Numerierung, die zu seiner Beschreibung benutzt würde, wenn es sich um einen isolierten Graphen handelt.

Beispiel: [(06.1^{1,4})2:10(4.1²)]

N-4.22. Der jedes Paar von Moduldeskriptoren in einem Verbandeskriptor trennende *Lokantensatz* wird von der definitiven fortlaufenden Numerierung für den gesamten Verband gemäß Regel N-5 hergeleitet. Jeder Lokantensatz wird wie folgt geschrieben: a) der Lokant des Nodus im vorher numerierten Teil des Graphen, an welchen das folgende Modul geknüpft ist, b) ein Doppelpunkt und c) der Lokant des Nodus im folgenden Modul, über den dieses Modul an den vorher numerierten Teil des Graphen geknüpft ist.
Beispiel: [(06.1^{1,4})2:10(4.1²)]

N-4.23. In einem *unverzweigten Verband* mit *endständigem* Hauptmodul bezieht sich der erste Lokant jedes Lokantensatzes auf das unmittelbar voranstehende Modul. Jeder Lokant ist höher als der unmittelbar voranstehende Lokant im Deskriptor.

Beispiel: [(06)1:7(06)10:13(06)16:19(06)]

Anmerkung: Die Lokantenserie 1,7,10,13,16,19 wächst stetig an.

N-4.24. In einem *unverzweigten Verband* mit nicht-terminalem Hauptmodul und in einem *verzweigten Verband* bezieht sich der erste Lokant mindestens eines Lokantensatzes auf ein Modul, das im Deskriptor früher als das unmittelbar voranstehende Modul zitiert wurde. Dieser Lokant ist niedriger als der unmittelbar voranstehende Lokant im Deskriptor.

Beispiele:

1. [(06)1:7(05)4:12(05)]

Anmerkung: In diesem Deskriptor eines Verbandes mit nicht-terminalem Hauptmodul wächst die Lokantenserie 1,7,4,12 nicht stetig an; der Lokant 4, der kleiner als 7 ist, bezieht sich auf das erste Modul im Deskriptor und nicht auf das zweite Modul.

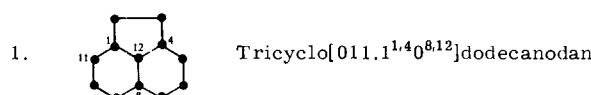
2. [(06)1:7(06)9:13(06)11:19(06)]

Anmerkung: In diesem Deskriptor eines verzweigten Verbandes wächst die Lokantenserie 1,7,9,13,11,19 nicht stetig an; der Lokant 11, der kleiner als 13 ist, bezieht sich auf das zweite Modul im Deskriptor und nicht auf das dritte Modul.

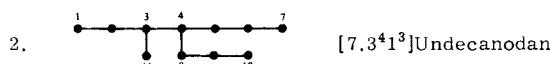
N-4.3. Die Ranghöhe von Modulen in einem Verband wird durch die folgenden Kriterien bestimmt, die nacheinander angewendet werden, bis eine Entscheidung erreicht ist^[19]:

- a) größte Zahl an Nodi,
- b) cyclisches Modul vor acyclischem Modul,
- c) größte Zahl von Ringen oder Zweigen (Seitenketten),
- d) größter Hauptring oder längste Hauptkette,
- e) längste Brücke oder längster Zweig (Seitenkette),
- f) niedrigste Lokanten für die Verknüpfung von Brücken oder Zweigen (Seitenketten).

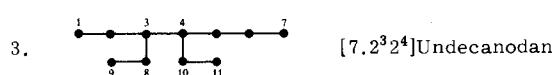
Beispiele (gemäß abnehmender Ranghöhe; das Kriterium, das die Ranghöhe eines Beispiels gegenüber dem folgenden festlegt, ist jeweils angegeben):



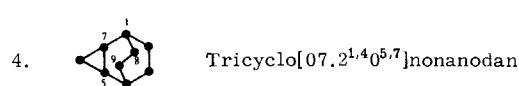
(nach Kriterium a ranghöher als das folgende Modul)



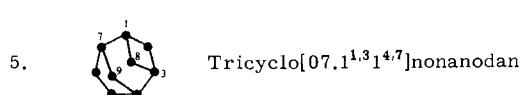
(nach Kriterium e ranghöher als das folgende Modul)



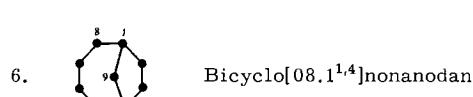
(nach Kriterium e ranghöher als das folgende Modul)



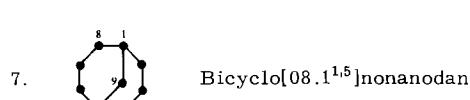
(nach Kriterium a ranghöher als das folgende Modul)



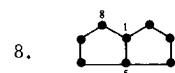
(nach Kriterium e ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium c ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium f ranghöher als das folgende Modul)



Bicyclo[08.0^{1,5}]octanodan

(nach Kriterium a ranghöher als das folgende Modul)



Bicyclo[07.1^{1,3}]octanodan

(nach Kriterium d ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium b ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium a ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium c ranghöher als das folgende Modul)



(nach Kriterium f ranghöher als das folgende Modul)



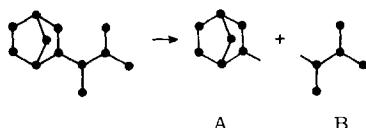
(nach Kriterium d ranghöher als das folgende Modul)

N-4.4. Der Name eines Verbandes besteht aus: a) einem kennzeichnenden Präfix (wie „cyclo-“, „bicyclo-“ usw.), das die Gesamtzahl der Ringe in einem Verband anzeigt, b) dem Verbandesdeskriptor (siehe Regel N-4.2), c) einem multiplizierenden Präfix^[12], das die Gesamtzahl der Nodi im Verband angibt, und d) der Endung „-nodan“^[13].
Beispiel: Bicyclo[(06)1:7(05)4:13(3)]tetradecanodan

Regel N-5. - Definitive Numerierung von Verbänden

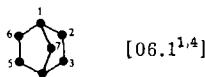
N-5.1. Die definitive Numerierung eines Verbandes legt den korrekten Verbandesdeskriptor fest. Diese Numerierung beginnt mit dem Hauptmodul (siehe Regel N-4.2), dessen ursprüngliche Numerierung beibehalten wird. Die anderen Module werden fortlaufend renumeriert, wobei man mit einem an das Hauptmodul grenzenden Modul beginnt und, wenn nötig, wie in den Regeln N-5.3 und N-5.4 beschrieben fortfährt. Jedes Modul wird renumeriert, indem man zu jedem seiner ursprünglichen Lokanten eine Zahl addiert, die gleich der Gesamtzahl der Nodi in den Modulen ist, denen bereits endgültige Lokanten zugeordnet worden sind. Bleibt eine Wahl für den Beginn und/oder die Richtung der Numerierung in einem Modul, ist diejenige Numerierung korrekt, die den Verknüpfungsnodi des Moduls mit anderen Modulen des Verbands die niedrigsten Lokanten zuordnet.

Beispiel:



Dieser Verband besteht aus zwei Modulen, A und B. Zur Numerierung wird wie folgt verfahren:

- a) Modul A, das ranghöchste Modul des Verbandes (**Regel N-4.3a**), wird numeriert und der Deskriptor gemäß **Regel N-3** erzeugt.

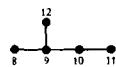


Da dieses Modul das Hauptmodul des Verbandes ist (siehe **Regel N-4.2**), behält es die Numerierung bei. In diesem Modul gibt es jedoch zwei Ausgangspunkte für die Numerierung und jeweils zwei mögliche Richtungen. Im Verband wird das Modul so numeriert, daß der Lokant für den Nodus der Verknüpfung mit dem nächsten Modul so niedrig wie möglich ist, d. h. 2 (nicht 3, 5 oder 6).

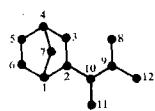
- b) Modul B wird numeriert und der Deskriptor gemäß **Regel N-1** erzeugt.



- c) Modul B wird renumeriert, indem man 7 (die Gesamtzahl der Nodi in Modul A) zu jedem ursprünglichen Lokanten addiert.



- d) Die Module, gegebenenfalls mit ihren neuen Numerierungen, werden rekombiniert und gemäß **Regel N-4.4** benannt.



Bicyclo[(06.1^{1.4})₂ : 10(4.1²)]dodecanodan

N-5.11. Alle Verbände, in welchen das Hauptmodul das Endglied einer einzigen linearen Kette von Modulen ist, werden durch Ausweitung des in **Regel N-5.1** beschriebenen Verfahrens numeriert und benannt.

Beispiel:



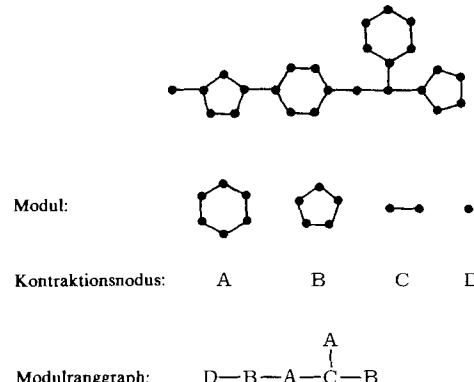
Bicyclo[(06)1 : 7(4)10 : 11(05)]pentadecanodan

N-5.12. In Verbänden, in denen das Hauptmodul an eine einzige, verzweigte Kette von Modulen oder an zwei oder mehr lineare oder verzweigte Ketten von Modulen geknüpft ist und in denen zwei oder mehr definitive Numerierungen möglich sind, wird die korrekte Numerierung nach der Rangordnung

der den **Modulrangdeskriptoren** des **Modulranggraphen** zugeordneten **Modulrangen** gewählt (siehe **Regeln N-5.2** und **N-5.3**). Wenn dieses Verfahren nicht schlüssig ist, wird die korrekte Numerierung durch Vergleichen der von den möglichen Numerierungen hergeleiteten Deskriptoren ausgesucht (siehe **Regel N-5.4**).

N-5.2. Ein **Modulranggraph** eines Verbandes repräsentiert die Module im Sinne ihrer relativen Ranghöhen. Der Ranggraph wird hergeleitet, indem man jedem Modul einen Großbuchstaben (Modulrangdeskriptor) zuordnet, der seine relative Ranghöhe im Verband angezeigt. Das (die) ranghöchste(n) Modul(e) wird (werden) mit A bezeichnet, die nächst-ranghöhen mit B usw. Wenn diese Buchstaben in den gleichen relativen Positionen wie die Module, die sie vertreten, angeordnet werden, bilden sie den **Modulranggraphen**.

Beispiel:

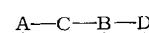


N-5.3. Die **Numerierung des Modulranggraphen**, d. h. die Zuordnung der Modulrangen, welche die Reihenfolge der definitiven fortlaufenden Numerierung des Verbandes bestimmt (siehe **Regel N-5.1**), beginnt mit dem Hauptmodul (siehe **Regel N-4.2**) und verläuft dann entsprechend abnehmender Ranghöhe, wie in **Regel N-5.33** definiert, durch jede an das Hauptmodul geknüpfte Kette von Kontraktionsnodis^[23].

N-5.31. Jeder Kette von Kontraktionsnodi, die an das Hauptmodul des Ranggraphen geknüpft ist, werden **Modulrangen** zugeordnet.

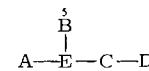
N-5.311. Eine *unverzweigte Kette* von Kontraktionsnodi wird fortlaufend im Anschluß an das Hauptmodul numeriert, das gemäß **Regel N-5.1** die Rangzahl 1 bekommt.

Beispiel:



N-5.312. In einer verzweigten Kette von Kontraktionsnodi werden zuerst die *längste unverzweigte Kette* (die Hauptkette) gemäß **Regel N-5.311**, und danach die an die Hauptkette geknüpften Zweige numeriert, die gegebenenfalls entsprechend **Regel N-5.313** nach abnehmender Ranghöhe angeordnet werden.

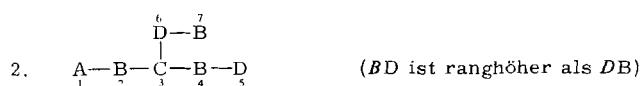
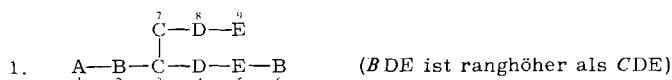
Beispiel:



N-5.313. Wenn eine *verzweigte Kette* von Kontraktionsnodi zwei oder mehrere gleich lange Ketten enthält, werden Rangzahlen zuerst der unverzweigten Kette zugeordnet, welche an der Stelle der ersten Abweichung den ranghöchsten Kontraktionsnodus aufweist. Die Modulrangdeskriptoren

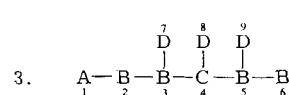
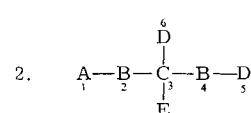
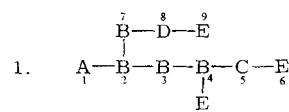
werden dabei gemäß ihrer in **Regel N-4.3** definierten Ranghöhe Term für Term verglichen, zunächst unabhängig von ihren Positionen in der Kette und dann nach ihren Positionen in der Kette.

Beispiele:



N-5.314. Zweige der Hauptkette von Kontraktionsnodi werden entsprechend den folgenden Kriterien numeriert, die nacheinander angewendet werden, bis eine definitive Numerierung erreicht ist: a) nach abnehmender Länge, b) nach der Rangfolge der Modulrangdeskriptoren wie in **Regel N-5.313** definiert, und c) nach ansteigendem Zahlenwert der Rangzahl für den Kontraktionsnodus im bereits numerierten Teil der Kette, an den der Zweig geknüpft ist.

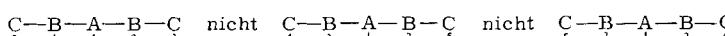
Beispiele:



N-5.315. Verzweigte Zweige von Kontraktionsnodi werden nach den **Regeln N-5.312** und **N-5.313** numeriert.

N-5.32. Wenn zwei oder mehr Ketten von Kontraktionsnodi an das Hauptmodul geknüpft sind, wird jede Kette vollständig mit *Modulrängzahlen* gemäß **Regel N-5.31** versehen, bevor man zur nächsten fortschreitet

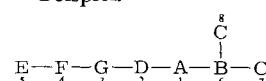
Beispiel:



N-5.33. Wenn zwei oder mehr Ketten von Kontraktionsnodi an das Hauptmodul geknüpft sind, werden ihnen *Modulrängzahlen* nach der Ranghöhe entsprechend den folgenden Kriterien zugeordnet, die nacheinander angewendet werden, bis eine definitive Numerierung erreicht ist:

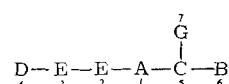
a) Größte Zahl von Kontraktionsnodi in der gesamten Kette.

Beispiel:



b) Längste unverzweigte Kette von Kontraktionsnodi.

Beispiel:



c) Ranghöchster Kontraktionsnodus an der Stelle der ersten Abweichung, wobei die Modulrangdeskriptoren gemäß ih-

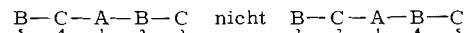
rer in **Regel N-4.3** definierten Rangfolge Term für Term verglichen werden, unabhängig von ihren Positionen in den beiden Ketten.

Beispiel:



d) Ranghöchster Kontraktionsnodus mit der niedrigsten Rangzahl.

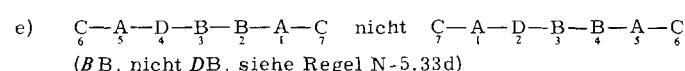
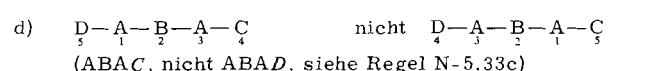
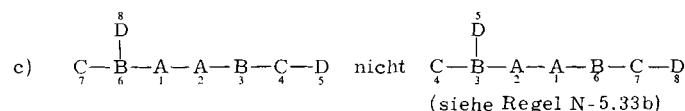
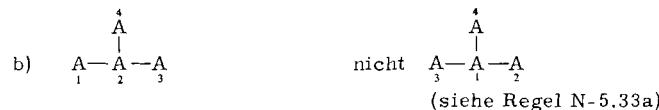
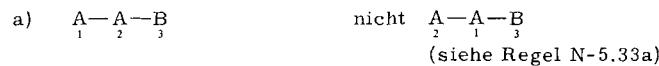
Beispiel:



(BC, nicht CB, denn 2 ist kleiner als 3)

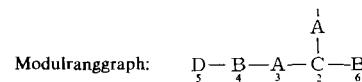
N-5.34. Wenn ein Verband zwei oder mehr Module des höchsten Ranges enthält, d. h. im Ranggraph der Modulrangdeskriptor A mehrfach vorkommt, dann ist das *Hauptmodul* dasjenige ranghöchste Modul, an welches die gemäß **Regel N-5.33** bestimmte ranghöchste Kette von Kontraktionsnodi geknüpft ist.

Beispiele:



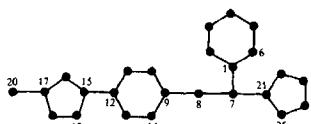
N-5.35. Wenn die *Numerierung des Modulranggraphen* durch die **Regeln N-5.31** bis **N-5.34** eindeutig festgelegt ist, wird ein Verband nach dem Verfahren der **Regel N-5.1** numeriert, das auf die Module gemäß ansteigendem numerischen Wert ihrer Rangzahlen angewendet wird.

Beispiel (siehe den Verband, der **Regel N-5.2** illustriert):



Modulrängzahl	Kontraktionsnodus, Ranghöhe	Nodi, Zahl	Module, Lokanten	Verband, Lokanten
1	A	6	1-6	1-6
2	C	2	1-2	7-8
3	A	6	1-6	9-14
4	B	5	1-5	15-19
5	D	1	1	20
6	B	5	1-5	21-25

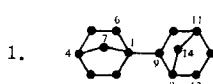
N-5.4. Wenn eine *definitive Reihenfolge* für die *Numerierung* der Module eines Verbandes durch alleinige Anwendung der Prinzipien des Modulranggraphen (**Regeln N-5.2** und **N-5.3**)^[22] nicht festgelegt werden kann, ist diejenige Rei-



Tetracyclo[{\{06\}1 : 7(2)8 : 9(06)12 : 15(05)17 : 20(1)-7 : 21(05)}]pentacosanodan

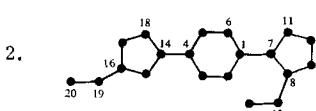
henfolge korrekt, die zum Verbanddeskriptor mit den niedrigsten Lokanten für die Verknüpfungsstellen der Module führt. Der Satz niedrigster Lokanten ist die Lokantenserie, die den niedrigsten Lokanten an der Stelle der ersten Abweichung aufweist, wenn zwei oder mehr Serien in der Reihenfolge des Erscheinen im Verbanddeskriptor Term für Term verglichen werden.

Beispiele:



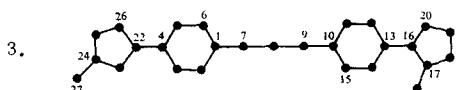
Tetracyclo[{\{06.1^1.4\}1 : 9(06.1^1.4)}]-tetradecanodan

Anmerkung: Der Deskriptor [{(06.1^1.4)2:8(06.1^1.4)}] ist nicht korrekt, weil die Lokantenserie 2,8 für die Modulverknüpfung höher als 1,9 ist.



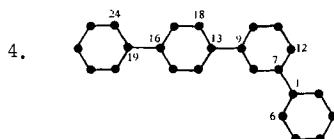
Tricyclo[{\{06\}1 : 7(05)8 : 12(2)4 : 14(05)16 : 19(2)}]icosanodan

Anmerkung: Der Deskriptor [{(06)1:7(05)9:12(2)4:14(05)15:19(2)}] für diesen Verband (Ranggraph: C-B-A-B-C) ist nicht korrekt, weil die Lokantenserie 1,7,9,12,4,14,15,19 höher als 1,7,8,12,4,14,16,19 ist.



Tetracyclo[{\{06\}1 : 7(3)9 : 10(06)13 : 16-(05)17 : 21(1)4 : 22(05)24 : 27(1)}]heptacosanodan

Anmerkung: Der Deskriptor [{(06)1:7(3)9:10(06)13:16(05)18:21(1)4:22(05)23:27(1)}] für diesen Verband (Ranggraph: D-B-A-C-A-B-D) ist nicht korrekt, weil die Lokantenserie 1,7,9,10,13,16,18,21,4,22,23,27 höher als 1,7,9,10,13,16,17,21,4,22,24,27 ist.



Tetracyclo[{\{06\}1 : 7(06)9 : 13(06)16 : 19(06)}]tetracosanodan

Anmerkung: Der Deskriptor [{(06)1:7(06)10:13(06)15:19(06)}] ist nicht korrekt, weil die Lokantenserie 1,7,10,13,15,19 höher als 1,7,9,13,16,19 ist.

6. Ein Verfahren, um die korrekte Numerierung und den korrekten Namen eines Verbandes herzuleiten

Das Konzept des Modulranggraphen (siehe **Regeln N-5.2** und **N-5.3**) ermöglicht es, selbst sehr komplexe Verbände mit Leichtigkeit zu numerieren. Wir illustrieren nun eine Verfahrensweise, die uns gute Dienste bei der Numerierung und Benennung von Verbänden geleistet hat. Wir haben mit Bedacht einen sehr komplexen Verband ausgewählt (siehe Abb. 1), weil sich an ihm der Gebrauch des Modulranggraphen gut illustrieren lässt, obwohl die meisten normalerweise in chemischen Verbindungen angetroffenen Verbände viel einfacher sind.

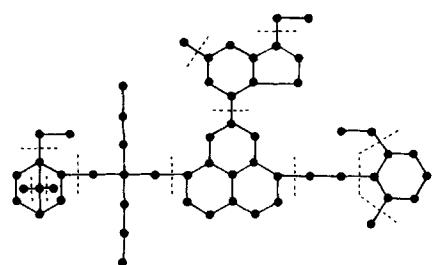


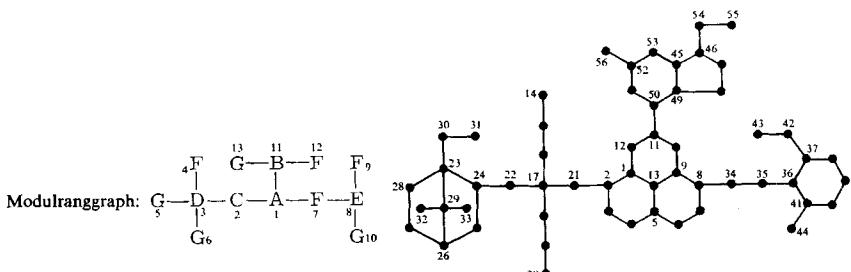
Abb. 1. Der Verband wird in Module zerlegt.

Ein Verband wird in der folgenden schrittweisen Manier nummeriert und benannt: 1) Der Verband wird wie in Abbildung 1 gezeigt in seine Module zerlegt, 2) die Module werden nach abnehmender Anzahl an Nodi sortiert, 3) jedes Modul wird nach den **Regeln N-1, N-2** oder **N-3** nummeriert, 4) der Deskriptor für jedes Modul wird hergeleitet, 5) der Rang jedes Moduls wird nach **Regel N-4.3** bestimmt, 6) der Ranggraph wird gezeichnet, und die Rangzahlen werden gemäß den **Regeln N-5.2** und **N-5.3** zugeordnet, 7) Verbandlokanten werden festgelegt, indem man jedes Modul entsprechend den **Regeln N-5.1** und **N-5.3** oder **N-5.4** renumeriert, 8) die Verbandlokanten werden an den Graphen geschrieben, 9) der Name des Verbandes wird erzeugt (siehe **Regel N-4.4**), und 10) der Name wird am Graph überprüft. Dieses Verfahren wird in Abbildung 2 illustriert.

Nodalnamen lassen sich leicht auf Übereinstimmung mit den Strukturformeln prüfen und liefern eine Fülle von Informationen über die Struktur. Wie bei der von-Baeyer-Nomenklatur enthält der Deskriptor eines Nodalnamens all die Information, die nötig ist, um die Struktur herzuleiten; der redundante Rest des Namens bietet eine Kontrollmöglichkeit für den Deskriptor und ist auch für die Auflistung in einem alphabetischen Register wertvoll.

Ein Blick auf einen Nodalnamen ergibt viele brauchbare Informationen, die bei der Überprüfung des Namens und der Vergegenwärtigung der Struktur helfen. So zeigt z. B. die Inspektion des Namens [7.1^1.4]Nonanodan folgendes: 1) Die Struktur ist acyclisch, da der Name nicht mit einem „Cyclo“-Term und der Deskriptor nicht mit Null beginnt, 2) die Hauptkette besteht aus sieben Nodi, und es sind zwei Zweige von je einem Nodus vorhanden, die beide an den vierten Nodus geknüpft sind, und 3) die Gesamtzahl der Nodi beträgt neun, was sich durch Summierung der auf der Zeile stehenden Zahlen ergibt und durch den Term „nona“ nach dem Deskriptor bestätigt wird.

Modul, Struktur	Nodi, Zahl	Modul, Deskriptor	Modul, Ranghöhe	Modul- rangzahl	Verband, Lokanten
	13	[012.1 ^{1,5} 0 ^{9,13}]	A	1	1-13
	9	[7.1 ⁴ 1 ⁴]	C	2	14-22
	9	[09.0 ^{1,5}]	B	11	45-53
	6	[06.1 ^{1,4}]	D	3	23-29
	6	[06]	E	8	36-41
	2	[2]	F	4	30-31
	2	[2]	F	7	34-35
	2	[2]	F	9	42-43
	2	[2]	F	12	54-55
	1	[1]	G	5	32
	1	[1]	G	6	33
	1	[1]	G	10	44
	1	[1]	G	13	56



Octacyclo[(012.1^{1,5}0^{9,13})2 : 21(7.1⁴1⁴)22 : 24(06.1^{1,4})23 : 30-(2)29 : 32(1)29 : 33(1)8 : 34(2)35 : 36(06)37 : 42(2)41 : 44-(1)11 : 50(09.0^{1,5})46 : 54(2)52 : 56(1)]hexapentacontanodan

Abb. 2. Illustratives Verfahren zur Ableitung der korrekten Numerierung und des korrekten Namens eines Verbandes.

Gleichermaßen zeigt die Inspektion des Namens Bicyclo[06.1^{1,4}]heptanodan an: 1) Die Struktur ist cyclisch, da der Term „cyclo“ vor dem Deskriptor steht und der Deskriptor mit Null beginnt, 2) die Struktur besteht aus zwei Ringen, weil der Deskriptor zwei Terme enthält und der Term „bi“ vor cyclo steht, und 3) die Gesamtzahl der Nodi beträgt sieben, was sich durch Summierung der auf der Zeile stehenden Zahlen ergibt und durch den Term „hepta“ nach dem Deskriptor bestätigt wird.

Eine solche Inspektion ist besonders nützlich, wenn man den Namen eines komplexen Verbandes (Abb. 2) überprüft. Aus dem Verbanddeskriptor kann man entnehmen, daß insgesamt acht Ringe vorliegen; diese Zahl erhält man, wenn man zählt, wieviele Zahlen in den Moduldeskriptoren, die mit einer Null beginnen, auf der Zeile stehen (d. h. 3 + 2 + 1 + 2); dabei sollte acht entsprechend dem numerischen Präfix „octa“ zum Term cyclo vor dem Verbanddeskriptor gefunden werden. Durch Addition aller auf der Zei-

le stehenden Zahlen wird die Gesamtzahl der Nodi in der Struktur zu 56 bestimmt (d. h. $12+1+7+1+1+6+1+1+2+1+1+2+6+2+1+9+2+1$); dies sollte dem numerischen Präfix „hexapentaconta“ entsprechen, welches sich an den Deskriptor anschließt.

7. Die Herleitung der Struktur eines Verbandes aus seinem Namen

Die Inspektion des Verbanddeskriptors ist auch äußerst wertvoll, wenn man die Struktur eines komplexen Verbandes von seinem Namen herleitet. Aus dem Namen

Ocacyclo[$(012.1^{1,5}0^{9,13})2:21(7.1^{4,14})22:24(06.1^{1,4})23:30(2)29:32(1)-29:33(1)8:34(2)35:36(06)37:42(2)41:44(1)11:50(09.0^{1,5})46:54(2)-52:56(1)$]hexapentacontanodan

der für den komplexen Verband in Abschnitt 6 abgeleitet wurde, können wir durch Inspektion des Deskriptors die fol-

Modul, Deskriptor	Struktur	Verband, Lokanten
[012.1 ^{1,5} 0 ^{9,13}]		
[7.1 ⁴ 1 ⁴]		
[06.1 ^{1,4}]		
[2]		
[1]		
[1]		
[2]		
[06]		
[2]		
[1]		
[09.0 ^{1,5}]		
[2]		
[1]		

Abb. 3. Illustratives Verfahren zur Ableitung der Struktur eines Verbandes aus seinem Namen.

genden Informationen erlangen: 1) Die Struktur ist ein Verband aus dreizehn Modulen, da der in eckige Klammern eingeschlossene Verbanddeskriptor dreizehn Moduldeskriptoren enthält, die jeweils in runden Klammern stehen, 2) vier der Module sind cyclisch, da vier Moduldeskriptoren mit einer Null beginnen, 3) der Verband hat insgesamt acht Ringe, da die vier Module, die cyclische Strukturen definieren, insgesamt acht Terme haben (und im Namen das Präfix „octa“ vor cyclo steht), 4) der Verband hat neun acyclische Module, davon ein verzweigtes, und 5) der gesamte Verband hat 56 Nodi, was sich durch Summierung aller auf der Zeile stehenden Zahlen innerhalb der Klammern ergibt und durch das an den Verbanddeskriptor anschließende Präfix „hexapentaconta“ bestätigt wird.

Die Struktur dieses Verbandes mag wie folgt vom Namen hergeleitet werden: 1) Jedes der dreizehn Module wird gezeichnet und gemäß seinem Deskriptor in der Reihenfolge seines Auftretens im Namen numeriert, 2) jedem Modul wird die Verbandnumerierung zugeordnet, indem man zu jedem Lokanten den höchsten Lokanten des vorhergehenden Moduls addiert, 3) die Module werden gemäß den Lokantensätzen für jedes Paar von Modulen im Verbanddeskriptor verbunden, 4) die Struktur (siehe Abb. 2) wird anhand des Namens, wie oben ausgeführt, überprüft.

Dieses Verfahren ist in Abbildung 3 zusammengefaßt.

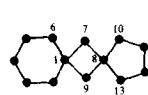
8. Schlußfolgerung

Wir haben ein umfassendes System zur Numerierung und Benennung von Graphen chemischer Verbindungen vorgestellt. Das System kann leicht der Benennung chemischer Verbindungen angepaßt werden und vermeidet eine Anzahl von Unzulänglichkeiten der existierenden Nomenklatursysteme. Dieses System ermöglicht dank des neuartigen Ansatzes nicht nur die einheitliche Nomenklatur organischer Verbindungen, sondern bietet auch neue Möglichkeiten für die Nomenklatur komplexer Koordinationsverbindungen sowie anorganischer und biochemischer Systeme. Weitere Publikationen werden die Anwendung dieses allgemeinen Systems auf spezielle Verbindungstypen umreißen.

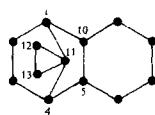
Eingegangen am 20. November 1978 [A 296]
Übersetzt von Prof. Dr. Dieter Hellwinkel, Heidelberg

- [1] IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry (1969), Sections A and B, 3. Aufl., und Section C, 2. Aufl. (vereinigt). Butterworths, London 1971.
- [2] IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry, Section D (Tentative). IUPAC Information Bulletin Appendices on Tentative Nomenclature, Symbols, Units, and Standards, No. 31, August 1973.
- [3] IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry, Section E, Stereochemistry (Recommendations, 1974). Pure Appl. Chem. 45, 11 (1976); IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry, Section F, Natural Products and Related Compounds, IUPAC Information Bulletin Appendices on Provisional Nomenclature, Symbols, Terminology, and Conventions, No. 53, Dezember 1976.
- [4] IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H. Pergamon Press, Oxford 1979; siehe auch Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie. Bd. 1. Verlag Chemie, Weinheim 1975.
- [5] IUPAC: Nomenclature of Organic Chemistry, Section G, noch unveröffentlicht.
- [6] Den Begriff „node“ für multivalente Zentren verwendeten M. Gordon, W. B. Temple in A. T. Balaban: Chemical Applications of Graph Theory. Academic Press, London 1976, S. 312. Der Begriff wurde von J. J. Sylvester, Am. J. Math. 1, 64 (1878) wie folgt eingeführt: „The conception of hydrocarbon graphs as ‘trees with nodes, branches and terminals’ ... [is] exclusively my own and [was] used by me in my communications with Professor Crum Brown on the subject and stated by me in a letter to Professor Cayley

- who has adopted [it] as the basis of his own isomeric researches". Es sei darauf hingewiesen, daß es bei der Nodalnomenklatur von Vorteil ist, unter dem Term „Nodus“ auch Endglieder (d. h. „einwertige“ Zentren) zu verstehen und den Term „Graph“ begrifflich von chemischen Strukturen mit spezifizierten Nodi und Bindungen zu trennen.
- [7] K. Hirayama, Tetrahedron Lett. 1972, 2109; Th. Kauffmann, Tetrahedron 28, 5183 (1972).
- [8] Wie im erweiterten von-Baeyer-Nomenklatursystem genügt im Nodalsystem der Deskriptor, um die Struktur abzuleiten.
- [9] Im Gegensatz zur klassischen organischen Nomenklatur werden alle acyclisch angeordneten Nodi, die nicht durch cyclisch angeordnete Nodi unterbrochen sind, zusammen als eine Einheit behandelt. Außerdem sei auf folgendes hingewiesen: Aus der Definition der zu Supernodi kontrahierten acyclischen und cyclischen Module folgt, daß die resultierenden Supergraphen acyclic sein müssen.
- [10] Die Summe der Zahlen, die die Kettenlänge anzeigen, ist gleich der Gesamtzahl der Nodi, und da die Lokanten für die Verknüpfungsstellen durch hochgestellte Zahlen angegeben sind, genügt der Deskriptor zur Herleitung der Struktur. Letzteres gilt auch für das derzeit gebräuchliche von-Baeyer-System.
- [11] Da die Zweige in der Reihenfolge abnehmender Länge aufgeführt werden, können sich nur die hochgestellten Lokanten unterscheiden (vgl. Regel N-3.4).
- [12] Die multiplizierenden Präfixe sind die gleichen wie in Regel A-2.5 in [1] und in Tabelle III, S. 142, in [2], außer daß das Präfix „mono“ nicht verwendet wird und – in Übereinstimmung mit einer Entscheidung für Sektion G [5] – das Präfix für zwanzig „icos“ anstatt „eicos“ geschrieben wird. Weitere Präfixe können von den Namen in Regel A-1.1 in [1] abgeleitet werden.
- [13] Wie in Abschnitt 3 erläutert, illustrieren wir die Prinzipien der Nodalnomenklatur der Bequemlichkeit halber hauptsächlich mit von organischen Strukturen hergeleiteten Graphen und gebrauchen die allgemeine Endung „-an“ der klassischen Kohlenwasserstoff-Nomenklatur. Dies soll jedoch nicht implizieren, daß die Nodalnomenklatur allein für den Gebrauch in der substitutiven Nomenklatur vorgesehen ist. Da die Endung „-nodan“ in der substitutiven Nomenklatur das Konzept eines voll hydrierten Stammsystems nahelegen könnte, wird für ihre allgemeisten Anwendungen die Wahl einer anderen, ebenfalls von der Wurzel „nod“ abgeleiteten Endung in Betracht gezogen.
- [14] Um den Vergleich zwischen Nodalnomenklatur und traditioneller organischer Nomenklatur zu erleichtern, entsprechen die meisten Beispiele den in Sektion A in [1] angegebenen acyclischen Kohlenwasserstoffen.
- [15] In Nodaldamen für monocyclische Graphen drücken das Präfix „cyclo“ und die Null den gleichen Sachverhalt aus; ebenso ist es bei der Zahl und dem multiplizierenden Präfix. Diese Angaben werden jedoch beibehalten, um monocyclische Module in Verbanddeskriptoren von unverzweigten acyclischen Modulen zu unterscheiden. Ohne die Null, welche die Anwesenheit eines Rings anzeigen, ist ein Name wie „Cyclo[(51:6(4)]nonanodan“ zweideutig: Er könnte entweder für „Cyclo[(05)1:6(4)]nonanodan“ oder für „Cyclo[(5)1:6(04)]nonanodan“ stehen.
- [16] Demgemäß bilden zwei lediglich durch ein gemeinsames (Spiro-)Atom verbundene Ringe zusammen keinen Hauptring, sondern einen Hauptring und eine Brücke.
- [17] Gelegentlich kann, wie die Beispiele unten zeigen, eine längere Brücke erst dann numeriert werden, wenn eine kürzere Brücke numeriert worden ist.



Tricyclo[06.3^{1.1}₄^{8.8}]-tridecanodan



Tetracyclo[010.1^{1.4}₂^{11.11}₀^{5.1}₀]-tridecanodan

- [18] Die Gesamtzahl der Terme im Deskriptor eines polycyclischen Graphen ist gleich der Anzahl der Ringe, und die Summe der auf der Zeile stehenden Zahlen ist gleich der Anzahl der Nodi im gesamten Graph.
- [19] Die Rangordnung der polycyclischen Module (Regel N-4.3) folgt nicht der Auswahlmethode für polycyclische Deskriptoren (Regel N-3.6). Die Wahl des Deskriptors für polycyclische Graphen folgt der zur Numerierung der Struktur benutzten Methode. Bei jedem Schritt wird die Numerierung über die längstmögliche Brücke fortgesetzt, die im vorher numerierten Teil des Graphen an die Nodi mit den niedrigsten Lokanten geknüpft ist. Infolgedessen werden alle Zahlen, die entweder Brückenlängen oder Lokanten repräsentieren, nacheinander in der Reihenfolge ihres Auftretens im Deskriptor miteinander verglichen, wobei derjenige Deskriptor den Vorrang hat, in dem an der Stelle der ersten Abweichung entweder die längste Brücke oder der niedrigste Lokant auftritt. Andererseits scheint es besser mit üblichen Praktiken vereinbar zu sein, zur Auswahl des ranghöchsten Moduls eines Verbandes erst die Brückenlängen und dann, wenn eine Wahl bleibt, die hochgestellten Lokanten zu vergleichen. Es sollte darauf hingewiesen werden, daß in vielen Fällen beide Auswahlmethoden zum gleichen Ergebnis führen. – Kommentare zu dieser Entscheidung werden begrüßt.
- [20] Die Zahl der Ringe in einem polycyclischen System ist gleich der geringsten Zahl an Schnitten, die notwendig sind, um das System in eine acyclische Struktur umzuwandeln (siehe Regel A-32.12 in [1]).
- [21] Bei einigen dieser Beispiele wird der Trivial- oder Halbtrivialname des entsprechenden Kohlenwasserstoffs angegeben und durch ein Sternchen gekennzeichnet.
- [22] Die Symmetrie des Modulranggraphen schließt oft eine Festlegung der korrekten Reihenfolge der Numerierung der an das Hauptmodul geknüpften Module oder der Wahl des Hauptmoduls aus, wenn zwei oder mehr Module des höchsten Ranges vorhanden sind.
- [23] Die Auswahlregeln zur Numerierung des Modulranggraphen (Regel N-5.3) unterscheiden sich von denen zur Numerierung acyclischer Graphen (Regel N-1), weil Modulranggraphen mit Struktureinheiten (Modulen) zu tun haben, deren Komplexität stark variiert kann. Demgemäß berücksichtigen die Regeln für den Modulranggraphen die Natur der Kontraktionsnodi, während gemäß Regel N-1 die Natur der Nodi nicht die Numerierung des Graphen beeinflußt.