

ANGEWANDTE CHEMIE

96. Jahrgang 1984
Heft 1
Seite 1-84

Die Nodalnomenklatur II – Spezielle Nomenklatur für Stammhydride, freie Radikale, Ionen und Substituenten**

Von Noël Lozac'h* und Alan L. Goodson

In diesem Aufsatz wird das Verfahren beschrieben, nach dem der Nodalname einer organischen Verbindung gebildet wird. Stammhydridnamen – speziell Kohlenwasserstoffnamen – werden über die Namen von Strukturgraphen hergeleitet und dann so modifiziert, daß sie Bezeichnungen für Heteroatome, Unsättigungen und freie Valenzen sowie Ladungen enthalten. Die aus der klassischen organischen Nomenklatur bekannte substitutive Methode, obwohl kein integraler Bestandteil des Nodalsystems, kann dennoch zur Vereinfachung der Strukturgraphen genutzt werden, ohne die Logik des Nodalsystems zu beeinträchtigen. Hierzu wird gezeigt, wie die generell gemäß den IUPAC-Regeln gebildeten Präfixe und Suffixe zu verwenden sind. Die Rolle der Substitution ist in der organischen Nodalnomenklatur begrenzter als in der klassischen Nomenklatur, weil viele klassische Substituenten als Teil der Stammhydride behandelt werden. Aus den gleichen Gründen wird auch das Konzept der „charakteristischen Gruppe“ in der Nodalnomenklatur nicht angewendet und der Begriff „vorrangiger Substituent“ dem Begriff „vorrangige charakteristische Gruppe“ vorzogen.

1. Vorwort

Die klassische Nomenklatur organischer Verbindungen, die naturgemäß die historische Entwicklung der Organischen Chemie widerspiegelt, berücksichtigt im allgemeinen zuerst die chemische Natur der Atome, die ein Molekül bilden, und befaßt sich dann damit, wie diese Atome miteinander verbunden sind. Klassische systematische Namen entsprechen generell einer Molekülformel und sind zuweilen direkt von dieser Formel hergeleitet (z. B. Silan). Die Nodalnomenklatur hingegen kann mit einer Technik zur Konstruktion großer Gebäude verglichen werden. Sie erstellt zunächst eine Rahmenkonstruktion (z. B. eine mathematische Beschreibung einer chemischen Struktur^[1]) und fügt dann das Detail zu, das zur Vervollständigung eines

brauchbaren chemischen Namens notwendig ist. Gerade so wie neue Techniken seinerzeit den Bau von Wolkenkratzern ermöglichten, erleichtern die neuen Konzepte der Nodalnomenklatur die Beschreibung ausgedehnter chemischer Strukturen.

Die erste Veröffentlichung^[2] dieser Reihe (im folgenden als Teil I bezeichnet) zeigte, wie die Rahmenkonstruktion durch Rückführung chemischer Strukturen auf Graphen erzeugt wird, die dann numeriert und benannt werden. Diese Technik der Reduktion eines Problems auf einen Graphen und der anschließenden Problemlösung durch Manipulation des Graphen ist in der Graphentheorie allgemein gebräuchlich^[3, 4].

Die Namen der chemischen Strukturen werden erhalten, indem man die Beschreibung des Graphen nach Teil I durch die rein chemischen Informationen über die Natur der Atome und Bindungen ergänzt. Im vorliegenden Teil II wird beschrieben, wie die – im allgemeinen organischen – Stammhydride und ihre Derivate mit freien Valenzen, ionischen Zentren oder Substituenten durch Modifizierung des Graphennamens benannt werden können. Soweit wie möglich sollen dabei Präfixe und Suffixe mit wohlbekann-

* 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
Chemical Abstracts Service, Columbus, OH 43210 (USA)
** Teil I („Die Nodalnomenklatur – Allgemeine Prinzipien“) siehe [2].

ten chemischen Bedeutungen verwendet werden, wie sie in den IUPAC-Regeln zur Nomenklatur der Organischen Chemie kodifiziert sind^[5]. Um dem Leser die Herleitung der Namen von Stammhydriden aus denen der korrespondierenden Graphen zu erleichtern, beziehen sich viele Beispiele dieses Beitrags auf entsprechende Beispiele in Teil I.

Zunächst sei auf zwei wichtige Tatsachen hingewiesen:

1) Dieser Beitrag beschreibt *ein* Verfahren zur Anwendung der Nodalnomenklatur in der Organischen Chemie; andere Verfahren, die, wie die Cyclophannomenklatur, mit polynuklearen Nodi (Kontraktionsnodi) operieren, können ebenso die in Teil I dargelegte allgemeine Methode nutzen, sofern die Prinzipien zur Auswahl der Nodi klar definiert sind.

2) Die Regeln für Substituenten, Ionen und freie Radikale zeigen, wie die wichtigsten Prinzipien der IUPAC-Regeln auf Stammhydride angewendet werden, die nach dem Nodalsystem benannt sind. Bei der Ausarbeitung dieser Regeln haben die Autoren großen Nutzen aus der Tätigkeit der „IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry“ gezogen. Einige der hier vorgeschlagenen Regeln, auch wenn sie mit den allgemeinen Nomenklaturmethoden der IUPAC in Einklang sind, spiegeln aber nur die persönlichen Präferenzen der Autoren für eine der vielen von der IUPAC erwogenen Möglichkeiten wider.

2. Einführung

Gegen die Nodalnomenklatur wurde eingewandt, daß die Beschreibung eines Graphen nach den Regeln in Teil I zu langen Folgen von Ziffern und Satzzeichen führt und somit für den allgemeinen Gebrauch nicht praktikabel sei. Deshalb sind einige Erläuterungen notwendig.

Die Nodalnomenklatur ermöglicht eine einzige eindeutige und fortlaufende Numerierung für jedwelchen Graphen. Die Tatsache, daß diese Numerierung einzigartig ist, verhindert in Registern das Auseinanderreißen von Informationen über Verbindungen mit gleichem Kohlenstoffskelett. Die Tatsache, daß sie fortlaufend ist, macht sie für die Konstruktion von Konnektivitätstabellen und für den Substrukturabruft direkt verwertbar; dafür gibt es Verfahren, die den beim DARC- und CAS-ONLINE-System benutzten vergleichbar sind. Diese einzigartige und fortlaufende Numerierung ist aufs engste mit den in Teil I eingeführten Deskriptoren verknüpft^[2]. Um das Verständnis zu erleichtern, werden die typographischen Konventionen für die Deskriptoren beibehalten.

Da wir behaupten, daß die Nodalnomenklatur allgemein anwendbar ist, erscheint es uns wesentlich zu zeigen, daß sie vor allem auch bei komplizierten Strukturen funktioniert, bei denen die existierenden Nomenklaturregeln oft keine klaren Leitlinien bieten. Man sollte aber auch nur Vergleichbares vergleichen und dementsprechend die „Einfachheit“ der Nodalnomenklatur an Beispielen testen, die sich mit den vorhandenen Regeln eindeutig benennen lassen. Aus diesem Grunde haben wir in diesem Beitrag als Beispiele vielfach Verbindungen gewählt, die auch in den IUPAC-Regeln als Beispiele dienen^[5]. Die Regeln der Nodalnomenklatur werden somit direkt mit den existierenden IUPAC-Regeln verglichen.

Bei der weiteren Entwicklung der Nodalnomenklatur muß man zwei Probleme im Auge behalten.

Das erste ist der grundsätzliche Unterschied zwischen den Nomenklaturanforderungen der Primärliteratur und denen eines Registers.

Für Registerzwecke und für den Informationsabruft ist es von größter Bedeutung, ob das benutzte Nomenklatursystem zu einem einzigen und eindeutigen Namen für jede gegebene chemische Struktur führt. Die IUPAC-Regeln liefern oft mehrere Namen für eine Verbindung, und die Wahl eines „offiziellen Namens“ erfordert es wegen der fundamentalen Ungereimtheiten traditioneller Methoden häufig, daß der Anwender seine eigenen Auswahlregeln festlegt. Die Nodalnomenklatur hingegen kann für Registerzwecke sowie die Speicherung und den Abruf von Information einen einzigen und eindeutigen Namen für jede Verbindung festlegen, sofern die Prinzipien für die Auswahl der Nodi und Substituenten klar definiert sind.

In der Primärliteratur mag ein Autor eine Substanz so benennen, daß der Name die Natur der beschriebenen Untersuchungen wiederspiegelt. Ein anderer Autor mag dieselbe Substanz anders benennen, weil die Natur der von ihm beschriebenen Untersuchungen anders ist. Deshalb sind für die Primärliteratur nur eindeutige Namen erforderlich, für Register dagegen Namen, die nicht allein eindeutig, sondern soweit wie möglich auch einzigartig sind. Eine gewisse Flexibilität ist auch in die Nodalnomenklatur eingebaut: Während für Registerzwecke einzigartige Namen hergeleitet werden können, sind kürzere und ansprechendere Namen für den Gebrauch in der Literatur zugänglich.

Dies führt zum zweiten Problem, das bedacht werden muß. Es ist generell erkannt worden, daß die bestehenden Nomenklaturpraktiken der Verbesserung bedürfen. Wenn ein neues Nomenklatursystem entwickelt wird, besteht immer die Möglichkeit eines Konflikts zwischen den Erfordernissen des Chemikers und denen des Informationsspezialisten. Es ist einerseits möglich, die bestehenden Nomenklaturpraktiken geringfügig (aber häufig) zu ändern und so Verfahren und Namen beizubehalten, die dem Chemiker bekannt sind. Der Informationsspezialist andererseits würde ein vollkommen systematisches Nomenklatursystem vorziehen, das niemals modifiziert werden muß und eindeutige Namen liefert, die so einfach sind, wie es die Kompliziertheit der Strukturen erlaubt. Bei der Entwicklung der Nodalnomenklatur wollen wir einen Mittelweg zwischen diesen Extremen einhalten; deswegen zeigen wir auch, wie die substitutive Methode in der Nodalnomenklatur genutzt werden kann.

Die Anwendung der substitutiven Methode ist in der Nodalnomenklatur nicht vorgeschrieben, aber aus zwei Gründen ratsam. Zum einen vereinfacht die Abtrennung von Substituenten den Graphen und somit dessen Namen. Zum anderen ziehen Chemiker es vor, einfache substituierte Strukturen auf den Graphen der unsubstituierten Struktur zurückzuführen, beispielsweise einen Chlorkohlenwasserstoff auf den Graphen des unsubstituierten Kohlenwasserstoffs. Für Registerzwecke erfordern ähnliche Gründe die Zusammenfassung verwandter Substanzen. Zu diesem Zwecke wird einer normal als „2-Chlor-1-butanol“ benannten Verbindung in Registern häufig der invertierte Namen „1-Butanol, 2-Chlor-“ gegeben. Dieses Verfahren

läßt sich problemlos auf substitutiv modifizierte Nodalnamen anwenden.

Es sei daran erinnert, daß die folgenden Regeln wegen der elementaren Logik der Nodalnomenklatur modular sind. Das heißt, daß die Charakteristika einer chemischen Verbindung in festgelegter Reihenfolge nacheinander mit Präfixen und/oder Suffixen beschrieben werden und daß jedes neue Merkmal die Numerierung des Skeletts nur dann beeinflussen kann, wenn die vorher erfaßten Merkmale Wahlmöglichkeiten gelassen haben.

Der erste Schritt ist die Benennung des Stammhydrids; damit erhält die Unsättigung eine hohe Priorität bei der Festlegung der Numerierung. Die entsprechenden Regeln sind besonders detailliert, da sie die Grundlage eines jeden Nodalnamens bilden.

Als nächstes folgt die Benennung freier Valenzen und ionischer Zentren an Skelettatomen. Es ist anzumerken, daß jegliche freie Valenz sich an einem Skelettatom befinden muß und daß der Gebrauch von „Onia“-Austausch-Präfixen gemäß Regel B-6.1^[5] nicht empfohlen wird, da die neutrale Stammverbindung vor Berücksichtigung der ionischen Zentren vollständig definiert sein soll.

Zuletzt werden die Substituenten nach ihrer Rangfolge benannt: anionische, kationische, neutrale. Die Nodalnomenklatur setzt dem Gebrauch von Substituenten relativ enge Grenzen (Regel N-10.1), ebenso wie der Rolle der Substituenten bei der Namenswahl. In der Nodalnomenklatur spielt beispielsweise kein Substituent eine so wichtige Rolle wie die „vorrangige Gruppe“^[5a] in den IUPAC-Regeln für acyclische Verbindungen. Dementsprechend wird für einen als Suffix benannten Substituenten, der nur gegenüber anderen Substituenten die Priorität für niedrige Lokanten hat, der Begriff „vorrangiger Substituent“ gewählt.

Aus Gründen der Folgerichtigkeit gibt es keine Ausnahmen bei der Benennung charakteristischer Gruppen, und substitutive Präfixe werden ausgiebiger als in der IUPAC-Nomenklatur verwendet (z. B. für Aldehyde, Ketone und Nitrile). Aus dem gleichen Grunde werden radikofunktionelle Namen überhaupt nicht benutzt (z. B. für Ester und Säurehalogenide). Wenn über die gegenwärtige Nomenklatur keine geeigneten Präfixe zugänglich sind, werden Gruppen von Substituenten mit einem einzigen Lokanten belegt, z. B. „(Mercapto,oxo)“ für [C](O)SH in S-Thiocarbonsäuren, „(Amino,oxo)“ für [C](O)NH₂ in Carbonsäureamiden, „(Chlor,oxo)“ für [C](O)Cl in Säurehalogeniden. Dieses Verfahren bietet den Vorteil, daß sich die funktionelle Gruppe leicht identifizieren läßt, ohne daß man von der allgemeinen substitutiven Methode abweichen müßte.

3. Glossar

Viele der in diesem Beitrag benutzten Begriffe sind bereits in Teil I definiert worden^[2a]. Die spezielle Nodalnomenklatur erfordert einige zusätzliche Definitionen.

Mononuclearer Nodus: Ein Nodus, der einem einzigen (Mononuclear Node) Skelettatom entspricht. Wird (siehe Nodus^[2a]) hauptsächlich benutzt, um den Unterschied zu polynuclearen (Kontraktions-)Nodi zu betonen.

Polynuclearer Nodus: (Polynuclear Node) (siehe Kontraktionsnodus^[2a])

Satellitenatom: (Satellite Atom)

Skelett: (Skeleton)

Stammelement^[6]: (Parent Element)

Stammhydrid: (Parent Hydride)

Substituent:

Wird hauptsächlich benutzt, um die polyatomare Natur von Kontraktionsnodi zu betonen und um diese von mononuclearen Nodi zu unterscheiden.

Ein an ein Skelettatom gebundenes einwertiges Atom (gewöhnlich Wasserstoff), das nicht als Teil des Strukturgraphen angesehen wird.

Die Struktur, die sich ergibt, wenn Nodi und Verbindungslien (oder Konnektivitäten) eines Strukturgraphen spezifiziert werden. Sie enthält weder Satellitenatome noch Substituenten.

Ein Element, dessen Identität am Ende des Namens eines gesättigten Stammhydrids angegeben wird. Andere Elemente, so vorhanden, werden mit Austausch-Präfixen wie „Oxa“- oder „Aza“- gekennzeichnet. Das Stammelement ist das häufigste oder eines der häufigsten Elemente des Skeletts. Enthält das Skelett gleich viele Atome von zwei oder mehr Elementen einschließlich Kohlenstoff, wird Kohlenstoff als Stammelement vorgezogen. Wenn sich Kohlenstoff nicht unter den häufigsten Elementen des Skeletts befindet, gilt als Stammelement das in Tabelle 3 zuerst aufgeführte. Das Konzept des Stammelements bezieht sich auf Graphen, die nur mononucleare Nodi aufweisen.

In der organischen Nodalnomenklatur dasjenige Elementhydrid, das man durch Austausch aller als Substituenten betrachteten Atome oder Gruppen gegen Wasserstoff erhält. Nach dieser Definition sind zwar Endungen für Unsättigung (z. B. „-en“, „-in“) Teil des Stammhydridnamens, nicht jedoch das Suffix für den vorrangigen Substituenten. Diese Vorschrift weicht von den IUPAC-Regeln für die vorrangige charakteristische Gruppe ab. In der Nodalnomenklatur wird der Begriff „Stammhydrid“ statt des Begriffs „Stammverbindung“ verwendet, um Verwechslungen mit der IUPAC-Terminologie zu vermeiden.

Ein Atom oder eine Gruppe, die Wasserstoff eines Stammhydrids ersetzen. Folgende Atome oder

Gruppen können in der organischen Nodalnomenklatur als Substituenten benannt werden (siehe Tabellen 1 und 2): a) Ein gegebenenfalls noch mit Wasserstoff verknüpftes Heteroatom, oder b) eine gegebenenfalls noch mit Wasserstoff verknüpfte Gruppe von Heteroatomen, die ausnahmsweise auch Kohlenstoff enthalten darf und keine interne Numerierung zur Festlegung ihrer Struktur benötigt. Die Substitution spielt demnach in der Nodalnomenklatur nur eine eingeschränkte Rolle. Das IUPAC-Konzept der charakteristischen Gruppe wird in der Nodalnomenklatur nicht verwendet.

Vorrangiger Substituent: Ein als Suffix benannter Substituent, der gegenüber anderen Substituenten Priorität für niedrige Lokanten hat (siehe Tabelle 2). Der Begriff „vorrangiger Substituent“ wird in der Nodalnomenklatur benutzt, um Verwechslungen mit dem Begriff „vorrangige charakteristische Gruppe“ zu vermeiden, der in den IUPAC-Regeln anders verwendet wird.

4. Allgemeine Konzepte der speziellen organischen Nodalnomenklatur

Chemische Verbindungen, die benannt werden sollen, können entweder neutrale Stammhydride sein oder davon durch Einführung freier Valenzen sowie Ladungen und/oder Substituenten abgeleitet werden. Die Anwendung der Nodalnomenklatur umfaßt vier Schritte:

- 1) Definition des Strukturgraphen;
- 2) Numerierung und Benennung des Strukturgraphen nach Teil I;
- 3) Spezifizierung der Nodi und Verbindungslinien (z. B. Benennung des neutralen Stammhydrids gemäß Regeln N-11, N-12 und/oder N-13);
- 4) Beifügung zusätzlicher Informationen, so vorhanden.

4.1. Definition des Strukturgraphen

Der Strukturgraph wird festgelegt durch 1) Abtrennung der als Substituenten behandelten Atome und Gruppen, 2) Abtrennung der Satellitenatome (in der Regel Wasserstoff), 3) Nichtbeachtung von Ladungen, Bindungszahlen, freien Valenzen und der Identität der Skelettatome sowie 4) Definition der Nodi als entweder mononuclear (Einzelatome) oder polynuclear (z. B. Kontraktionsnodi, wie sie unter anderem Benzol- und Pyrrolringe repräsentieren). In diesem Beitrag beschränken wir uns auf mononucleare Nodi.

In diesem Stadium ist die Definition der Substituenten der schwierigste Schritt. Wie bereits in der Einführung festgestellt wurde, ist die Anwendung der substitutiven Methode in der Nodalnomenklatur nicht vorgeschrieben, dürfte aber vielen Anwendern ratsam erscheinen. Deshalb werden in den vorgeschlagenen Regeln zwei Tabellen für diejenigen Atome oder Gruppen angegeben, deren Behandlung als Substituenten nach Ansicht der Autoren in der Nodalnomenklatur Vorteile mit sich bringt. Es sei jedoch betont, daß diese Tabellen nicht erschöpfend sind, und daß die weitere Entwicklung der Nodalnomenklatur es erfordern könnte, größere, dann aber vollständige Substituententabellen aufzustellen.

Außerdem sei hervorgehoben, daß diese auf Graphen basierende Nomenklatur den Gebrauch radikofunktioneller Namen ausschließt, wie man sie gewöhnlich für Ester benutzt (z. B. Methyl-acetat). „Binäre“ Namen dieser Art bleiben Substanzen wie beispielsweise Salzen vorbehalten, die als lockere Assoziate strukturell unabhängiger chemischer Einheiten angesehen werden.

4.2. Numerierung und Benennung des Strukturgraphen

Dieser Schritt ist in Teil I beschrieben worden^[2].

4.3. Spezifizierung der Nodi und Verbindungslinien: Stammhydride

Ist der Strukturgraph einmal numeriert und benannt, wird sein Name so modifiziert, daß er Informationen zur Spezifizierung der Nodi und Verbindungslinien einschließt. Zu diesem Zweck wird das Ende des Graphennamens derart verändert, daß daraus die Natur des Stammelements hervorgeht. Andere Elemente, so vorhanden, werden durch Austausch-Präfixe wie „Oxa“- und „Aza“-^[5b] gekennzeichnet. Unsättigung wird durch Suffixe angezeigt: entweder mit den traditionellen Termini „-en“ und „-in“ in ihrer üblichen Bedeutung als Doppel- bzw. Dreifachbindung oder mit den neuen Begriffen „-aren“ oder „-axen“, die zweifelsfrei die Anwesenheit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen angeben. Regel N-14.2 faßt zusammen, wie diese Merkmale die Wahl der Numerierung eines Graphen beeinflussen. Der resultierende Name ist der des Stammhydrids, beispielsweise eines Kohlenwasserstoffs.

Erst nachdem alle Nodi eines Graphen definiert worden sind und die Natur der Verbindungslinien dargelegt worden ist, wird zur Absättigung der Wertigkeit jedes Skelettatoms formal Wasserstoff addiert. Diese Wertigkeit ist die „normale Valenz“^[5c], sofern nichts anderes angegeben ist^[7].

Die systematische Numerierung von Strukturen ist eine hervorstechende Eigenheit der Nodalnomenklatur, die strebt ist, Gleches gleich zu behandeln, ohne dabei Rücksicht auf die bereits geschilderten strukturellen Besonderheiten zu nehmen (Prinzip der Modularität). Diese Einheitlichkeit der Behandlung steht im Kontrast zu einigen IUPAC-Regeln. Ein besonders wichtiges Beispiel ist die Numerierung von Heteroatomen in der Austauschnomenklatur. Das Nodalsystem behält die IUPAC-Methode^[5] für acyclische (Regel C-62.1) und polycyclische Strukturen

(Regel B-4.2) bei und wendet sie auch auf Monocyclen an; die abweichende Methode für Monocyclen (Regel B-4.1) wird nicht übernommen.

4.4. Beifügung zusätzlicher Informationen

Ist der Stammhydridname formuliert, wird, wenn notwendig, der Name der Verbindung durch Beifügung von Informationen über freie Valenzen sowie Ladungen, Substituenten, Stereochemie und isotope Modifikationen hergeleitet. Dies erfordert Regeln für die Zuordnung von Lokanten.

Die Anwendung des Modularitätsprinzips in der Nodalnomenklatur führt zu Regeln, die von den IUPAC-Regeln abweichen. Dies ist von besonderer Bedeutung für „vorrangige charakteristische Gruppen“, wie sie in den IUPAC-Regeln definiert sind. Das Nodalsystem erfasst alle Unsättigungen vor den Substituenten, selbst wenn diese mit Suffixen benannt werden, während die IUPAC-Regeln diese unterschiedlichen Merkmale nicht separat behandeln. Beispielsweise hat gemäß Regel C-15.1^[5] indizierter Wasserstoff Priorität gegenüber der vorrangigen charakteristischen Gruppe, welche ihrerseits Priorität gegenüber Mehrfachbindungen hat. Davon abgesehen ähnelt die Nodalmethode der IUPAC-Methode für polycyclische Systeme, bei welcher z.B. Heteroatome einen höheren Anspruch auf niedrige Lokanten als vorrangige charakteristische Gruppen haben. Dieses Vorgehen unterscheidet sich deutlich von den IUPAC-Praktiken für acyclische Systeme, bei denen vorrangige charakteristische Gruppen nicht nur bei der Zuordnung niedriger Lokanten (Regel C-62.1^[5]), sondern auch bei der Festlegung der Hauptkette Priorität gegenüber Heteroatomen haben (Regel C-63.1^[5]).

Die in diesem Beitrag vorgeschlagenen Regeln zeigen Möglichkeiten zur Einbeziehung freier Valenzen sowie von Ladungen und Substituenten, befassen sich aber nicht mit

Stereochemie und isotoper Modifikation, denen die Abschnitte E und H der IUPAC-Regeln gewidmet sind^[5]. Diese IUPAC-Regeln lassen sich problemlos auf Nodalnamen übertragen, und es sei nur angemerkt, daß die Nodalnumerierung die Anwendung der Regeln erleichtert, weil jeder Lokant nur einmal auftritt.

Für die Spezifizierung freier Valenzen sowie von Ladungen und Substituenten sind zwei Probleme zu lösen: Erstens die Wahl einer Terminologie; zweitens die Festlegung von Regeln für die Numerierung der Substanzen.

Zur Lösung des ersten Problems steht die für die gegenwärtigen IUPAC-Regeln festgelegte Terminologie^[5] zur Verfügung, die lediglich geringfügige Zusatzentscheidungen erfordert. Ein unvollständiger Satz von Substituentennamen ist in Regel N-10 angegeben; auf Begriffe zur Kennzeichnung freier Valenzen sowie Ladungen wird in Regel N-14.3 verwiesen.

Zur Lösung des zweiten Problems wurden die Regeln N-14.3 und N-14.5 formuliert. Sie zeigen, wie freie Valenzen sowie Ladungen und Substituenten die endgültige Numerierung beeinflussen können.

5. Vorgeschlagene Regeln für die spezielle Nodalnomenklatur

Regel N-10 – Substituenten

N-10.1. Substituenten sollen keine unverzweigten Ketten von mehr als drei Nicht-Wasserstoff-Atomen aufweisen und keiner internen Numerierung bedürfen. Ist ein Wasserstoffatom einer solchen Gruppe durch eine Gruppe ersetzt, die das Stammelement enthält, wird die resultierende Gruppe nicht als Substituent, sondern als Teil des Stammhydrids betrachtet. Eine nicht erschöpfende Liste von Substituenten, die in der Nodalnomenklatur nur als Präfixe zitiert werden, ist in Tabelle 1 zu finden.

Tabelle 1. Substituenten, die – bei Kohlenstoff als Stammelement – in der Nodalnomenklatur nur als Präfixe angegeben werden.

Substituent	Präfix	IUPAC-Regel [5]	Substituent	Präfix	IUPAC-Regel [5]
-F	Fluor	C-102.1	-SCl ₃	Trichlorthio [*]	C-621.2
-Cl	Chlor	C-102.1	-S(O)NH ₂	Sulfinamoyl	C-641.8(b)
-CIH ⁺	Chloronio	C-82.1	-S(O) ₂ NH ₂	Sulfonamoyl	C-641.8(b)
-ClO	Chlorosyl	C-106.2	-SNH ₂	Sulfenamoyl	C-641.8(b)
-ClO ₂	Chloryl	C-106.2	-SCN	Thiocyanato [**]	C-833.1
-ClO ₃	Perchloryl	C-106.2	-Se	Selenoxo	C-701.1
-Br	Brom	C-102.1	-SeH ₂ ⁺	Selenonio	C-82.1
-BrH ⁺	Bromonio	C-82.1	-SeCN	Selenocyanato [**]	C-833.1
-I	Iod	C-102.1	=N	Nitrilo	
-IH ⁺	Iodonio	C-82.1	=N ₂	Diazo	C-931.4
-ICl ₂	Dichloriod [*]	C-106.3	-N ₃	Azido	C-941.1
-IO	Iodosyl	C-106.1	=NH ₂ ⁺	Iminio	C-816.3
-IO ₂	Iodyl	C-106.1	-NH ₃ ⁺	Ammonio	C-82.1; C-816.3
-I(OH) ₂	Dihydroxyiod [*]	C-106.3	-NHOH	Hydroxyamino	C-841.1
=O	Oxo	C-311.1	-HNHN ₂	Hydrazino	C-921.1(b)
-OH ₂ ⁺	Oxonio	C-82.1	-NO	Nitroso	C-851.1
-OOH	Hydroperoxy	C-218.1(b)	-NO ₂	Nitro	C-852.1
-ONH ₂	Aminoxy	C-841.2(d)	=NOH	Hydroxymino	C-842.1(b)
-OCN	Cyanato [**]	C-833.1	-N(O)OH	aci-Nitro	C-852.2
=S	Thioxo	C-532.3	=NNH ₂	Hydrazono	C-922.1(b)
-SH ₂ ⁺	Sulfonio	C-82.1	-NC	Isocyanato [**]	C-833.1
-SF ₃	Pentafluorthio [*]	C-621.2	-NCO	Isocyanato [**]	C-833.1
-SF ₂ Cl	Chlordinfluorthio [*]	C-621.2	-NCS	Iothiocyanato [**]	C-833.1
-SCI	Chlorthio	C-621.2	-NCSe	Ioselenocyanato [**]	C-833.1

[*] Diese Substituenten können auch gemäß Regel N-10.3 benannt werden. [**] Ausnahme von der Regel, nach der in der organischen Nodalnomenklatur das Stammhydrid alle im Molekül vorhandenen Kohlenstoffatome enthalten soll. Die Verwendung des üblicherweise durch eine C–C-Bindung an das Stammhydrid gebundenen kohlenstoffhaltigen Substituenten Cyan (–CN) wird nicht empfohlen.

N-10.2. Substituenten werden generell als Präfixe benannt; Gruppen jedoch, die ein Proton abgeben können, sowie die entsprechenden anionischen Atome oder Gruppen werden unter den in **Regel N-14.1** aufgeführten Bedingungen als Suffixe benannt. Sind diese Bedingungen nicht erfüllt, werden Präfixe verwendet. Eine nicht erschöpfende Liste von wasserstoffhaltigen Substituenten, die in der Nodalnomenklatur entweder als Präfixe oder als Suffixe zitiert werden können, ist in Tabelle 2 zu finden.

Tabelle 2. Substituenten, die – bei Kohlenstoff als Stammelement – in der Nodalnomenklatur auch als Suffixe angegeben werden können. (In abnehmender Rangfolge bezüglich der Nennung als vorrangiger Substituent; siehe **Regel N-14.1**.)

Substituent	Präfix [**]	Suffix [**]	IUPAC-Regel [5]
-[C](O)OH	[*]	-säure (2a)	C-11.1; C-401.1
-[C](O)SH	[*]	-thio-S-säure (2a)	C-541.1
-[C](S)OH	[*]	-thio-O-säure (2a)	C-541.1
-[C](S)SH	[*]	-dithiosäure (2a)	C-541.1
-S(O) ₂ OH	Sulfo (1a)	-sulfonsäure (2a)	C-641.4
-S(O) ₂ SH	SH-Thiosulfo (1a)	-thiosulfon-S-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(O)(S)OH	OH-Thiosulfo (1a)	-thiosulfon-O-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(O)(S)SH	SH-Dithiosulfo (1a)	-dithiosulfon-S-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(S) ₂ OH	OH-Dithiosulfo (1a)	-dithiosulfon-O-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(S) ₂ SH	Trithiolsulfo (1a)	-trithiosulfonsäure (2a)	C-641.3
-S(O)OH	Sulfino (1b)	-sulfinsäure (2a)	C-641.2
-S(O)SH	SH-Thiosulfino (1b)	-thiosulfin-S-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(S)OH	OH-Thiosulfino (1b)	-thiosulfin-O-säure (2a)	C-641.3; C-641.4
-S(S)SH	Dithiosulfino (1b)	-dithiosulfinsäure (2a)	C-641.3
-SOH	Sulfeno (1b)	-sulfensäure (2a)	C-641.2
-Se(O) ₂ OH	Selenono (1b)	-selenonsäure (2a)	C-701.1
-Se(O)OH	Selenino (1b)	-seleninsäure (2a)	C-701.1
-SeOH	Seleneno (1b)	-selenensäure (2a)	C-701.1
-OH	Hydroxy (1c)	-ol (2b)	C-201.1; C-201.2; C-202.1
-SH	Mercapto (1d)	-thiol (2b)	C-511.1
-SeH	Hydroseleno (1e)	-selenol (2b)	C-701.1
-NH ₂	Amino	-amin (2c)	C-811.3; C-11.42
=NH	Imino	-imin (2c)	C-815.3(a)

[*] Bei Kohlenstoff als Stammelement werden zusammengesetzte Substituenten als Präfixe benannt, z. B. -[C](O)SH als „(Mercapto,oxo)“. [**] (1a) bis (1e) sowie (2a) bis (2c): Zur Benennung der von diesen Gruppen abgeleiteten anionischen Substituenten als Präfixe oder Suffixe siehe entsprechend nummerierte Vorschriften in **Regel N-10.4**.

N-10.3. Substitutive Präfixe können von den Namen mononuclearer Stammhydride hergeleitet werden (siehe Tabelle 3), in denen das Stammelement eine normwidrige Bindungszahl aufweist.

Beispiele (in Tabelle 1 genannte Substituenten)

1. -ICl₂ Dichlor-λ³-iodanyl
2. -I(OH)₂ Dihydroxy-λ³-iodanyl
3. -SF₅ Pentafluor-λ⁶-sulfanyl
4. -SF₂Cl Chlordinfluor-λ⁴-sulfanyl
5. -SCl₃ Trichlor-λ⁴-sulfanyl

N-10.4. Präfixe für anionische Substituenten, die durch Verlust eines Protons aus den in Tabelle 2 angegebenen Substituenten entstehen, werden durch folgende Veränderungen der Namen in der zweiten Spalte von Tabelle 2 erhalten:

- (1a) „-o“ wird „-onato“
- (1b) „-o“ wird „-ato“
- (1c) „Hydroxy“ wird „Oxido“
- (1d) „Mercapto“ wird „Sulfido“
- (1e) „Hydroseleno“ wird „Selenido“

Suffixe für anionische Substituenten, die durch Verlust eines Protons aus den in Tabelle 2 angegebenen Substi-

enten entstehen, werden durch folgende Veränderungen der Namen in der dritten Spalte von Tabelle 2 erhalten:

- (2a) „-säure“ wird „-at“
- (2b) „-ol“ wird „-olat“
- (2c) „-in“ wird „-inid“

Anionische Substituenten haben bei der Zitierung als vorrangige Substituenten Priorität gegenüber allen anderen

Substituenten. Für anionische Substituenten untereinander gilt die gleiche Rangfolge wie für die entsprechenden nichtionisierten Substituenten.

Beispiele (zur Numerierung siehe **Regeln N-14.3** und **N-14.5**):

1. $\text{O}_2\text{S}-\overset{1}{\text{CH}}_2-\overset{2}{\text{CH}}_2-\overset{3}{\text{CH}}_2-\overset{4}{\text{COSH}}$
4-(Mercapto, oxo)[4]tetran-1-sulfinat
 2. $\text{O}_2\text{S}-\overset{1}{\text{CH}}_2-\overset{2}{\text{CH}}_2-\overset{3}{\text{CH}}_2-\overset{4}{\text{COS}^-}$
4-Sulfinato[4]tetran-1-thioat
 3. $\text{O}_3\text{S}-\overset{1}{\text{CH}}_2-\overset{2}{\text{CH}}_2-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{4}{\text{CSSH}}$
1,5-Bis(mercапто, thioxо)[4.1²]pentan-4-sulfonat
 4. $\text{O}_3\text{S}-\overset{1}{\text{CH}}_2-\overset{2}{\text{CH}}_2-\overset{3}{\text{CH}}-\overset{4}{\text{CSS}^-}$
4-Sulfonato[4.1²]pentan-1,5-bis(dithioat)
 - 5.
- 2-Oxidocyclo[(06)1 : 7(1)]heptan(1-6)aren-7-oat
(zum Namen des Stammhydrids in Beispiel 5 siehe **Regel N-12.3**)

Regel N-11 – Gesättigte Stammhydride

N-11.1. Namen und Bindungszahlen für normale mononukleare Elementhydride sind in Tabelle 3 angegeben. Höhere Homologe dieser Elementhydride werden benannt, indem man im Namen des Strukturgraphen die Endung „-nodan“ durch den in Tabelle 3 aufgeführten Namen des entsprechenden mononuklearen Elementhydrids ersetzt.

Tabelle 3. Normale Bindungszahlen („Standard Bonding Numbers“, SBN), Namen für mononukleare Elementhydride und Präfixe für Elemente in der Austauschnomenklatur [5d].

Name	Element SBN	Elementhydrid Formel	Austausch- Präfix
Fluor	1	FH	Fluoran [a]
Chlor	1	ClH	Chloran [a]
Brom	1	BrH	Broma [a]
Iod	1	IH	Ioda [a]
Astat	1	AtH	Astata [a]
Sauerstoff	2	OH ₂	Oxidan [b]
Schwefel	2	SH ₂	Sulfan
Selen	2	SeH ₂	Selan
Tellur	2	TeH ₂	Tellan
Polonium	2	PoH ₂	Polana
Stickstoff	3	NH ₃	Azan
Phosphor	3	PH ₃	Phosphan
Arsen	3	AsH ₃	Arsan
Antimon	3	SbH ₃	Stiban
Bismut	3	BiH ₃	Bismutan
Kohlenstoff	4	CH ₄	Carban [c]
Silicium	4	SiH ₄	Silan
Germanium	4	GeH ₄	German
Zinn	4	SnH ₄	Stannan
Blei	4	PbH ₄	Plumban
Bor	3	BH ₃	Boran

[a] Diese Namen werden bei normwidrigen Bindungszahlen notwendig (siehe Regeln N-10.3 und N-14.1). [b] „Oxidan“ wird „Oxan“ vorgezogen, um Verwechslungen mit Hantzsch-Widman-Namen zu vermeiden. [c] Zur Wahl von Kohlenstoff als Stammelement siehe die besonderen Vorehrungen der Regeln N-11.2 und N-11.3.

Beispiele:

1. $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_3$ [5.1³]Hexacarban
2. $\text{SiH}_3-\text{SiH}_2-\overset{1}{\text{SiH}}-\text{SiH}_2-\overset{5}{\text{SiH}}_3$ [5.1³]Hexasilan
3. $\text{NH}_2-\text{NH}-\overset{1}{\text{N}}-\text{NH}-\overset{5}{\text{NH}}_2$ [5.1³]Hexaazan
4. $\text{HS}-\text{S}-\overset{4}{\text{S}}-\text{SH}$ [4]Tetasulfan

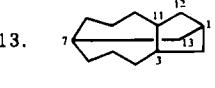
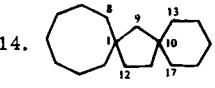
N-11.2. Die systematischen Namen der höheren Kohlenwasserstoffe sind in der Organischen Chemie so wohlbekannt, daß das Morphem „carb“ weggelassen werden kann, wenn keine Verwechslungsgefahr besteht. Enthält ein Molekül eines gesättigten Kohlenwasserstoffs weniger als vier Kohlenstoffatome, ist der Deskriptor nicht notwendig, da die Trivialnamen (z. B. Methan, Ethan, Propan und Cyclopropan) so fest verwurzelt sind, daß sie anstatt der systematischen Namen ([1]Carban, [2]Dicarban, [3]Tricarban bzw. Cyclo[03]tricarban) als Ausnahmen verwendet werden können. Die systematischen Namen [4]Tetracarban (oder [4]Tetran) und [3.1²]Tetracarban (oder [3.1²]Tetran) werden jedoch den Trivialnamen Butan und Isobutan vorgezogen, da hier der Deskriptor zur Unterscheidung der Isomere und zur Festlegung der Numerierung des Skeletts notwendig ist.

Beispiele (IUPAC-Namen^[5e] sind zum Vergleich in Klammern angegeben):

a) Gesättigte acyclische Kohlenwasserstoffe

1. $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3$ [4]Tetran [*]
(Butan)
2. $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{2}{\text{C}}\text{H}-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_3$ [3.1²]Tetran
 $\overset{4}{\text{C}}\text{H}_3$
(Isobutan)
3. $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-(\text{CH}_2)_4-\overset{6}{\text{C}}\text{H}_3$ [6]Hexan
(Hexan)
4. $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{3}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{5}{\text{C}}\text{H}_3$ [5.1³]Hexan
 $\overset{6}{\text{C}}\text{H}_3$
(3-Methylpentan)
5. $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{2}{\text{C}}\text{H}-(\text{CH}_2)_4-\overset{7}{\text{C}}\text{H}-\overset{8}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{10}{\text{C}}\text{H}_3$ [10.1²1⁷1⁸]Tridecan
 $\overset{11}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{12}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{13}{\text{C}}\text{H}_3$
(2,7,8-Trimethyl-decan)
6. $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-(\text{CH}_2)_2-\overset{4}{\text{C}}\text{H}-\overset{5}{\text{C}}\text{H}-(\text{CH}_2)_3-\overset{9}{\text{C}}\text{H}_3$ [9.3⁴1⁵]Tridecan
 $\overset{12}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{10}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{13}{\text{C}}\text{H}_3$
(5-Methyl-4-propylnonan)
7. $\overset{27}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{26}{\text{C}}\text{H}_2$ $\overset{28}{\text{C}}\text{H}_3$ $\overset{29}{\text{C}}\text{H}_3$ $\overset{30}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{3}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{5}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{7}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{9}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{25}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{23}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{21}{\text{C}}\text{H}-\overset{20}{\text{C}}\text{H}_2$
 $\overset{24}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{22}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{24}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{26}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{28}{\text{C}}\text{H}_3$
[13.6⁷6⁷2³1⁵1⁸1¹¹1¹⁵1¹⁷1²¹1²³]Tetracontan
(7,7-Bis(2,4-dimethylhexyl)-3-ethyl-5,9,11-trimethyltridecan)
8. $\overset{16}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{14}{\text{C}}\text{H}-\overset{13}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{17}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{19}{\text{C}}\text{H}_3$ $\overset{21}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{1}{\text{C}}\text{H}_3-(\text{CH}_2)_4-\overset{6}{\text{C}}\text{H}-(\text{CH}_2)_2-\overset{9}{\text{C}}\text{H}-(\text{CH}_2)_2-\overset{12}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{21}{\text{C}}\text{H}_3-\text{CH}_2-\overset{20}{\text{C}}\text{H}_2$
[12.4⁶3¹³2⁹1¹⁴1¹⁸]Tricosan
(4-Ethyl-7-(1-isobutyl-2-methylbutyl)dodecan)

b) Gesättigte cyclische Kohlenwasserstoffe

9.  Cyclopropan
10.  Cyclo[06]hexan
(Cyclohexan)
11.  Bicyclo[04.0^{1,3}]tetran
(Bicyclo[1.1.0]butan)
12.  Bicyclo[07.1^{1,4}]octan
(Bicyclo[3.2.1]octan)
13.  Tricyclo[012.1^{1,7}0^{3,11}]tridecan
(Tricyclo[5.5.1.0^{3,11}]tridecan)
(Perhydro-2,7-methanocyclopentacyclononen)
14.  Tricyclo[08.4^{1,1}5^{10,10}]heptadecan
(Dispiro[5.1.7.2]heptadecan)

[*] Von diesem Beispiel an ist das Morphem „carb“ weggelassen worden.

N-11.3. Heteroatomare Hydride, die Atome von mehr als einem Nicht-Wasserstoff-Element aufweisen, werden mit der Austauschnomenklatur benannt^[5b,f]. Eine solche Struktur wird zuerst so benannt, als ob das Skelett nur das Stammelement, d.h. das häufigste Nicht-Wasserstoff-Element, enthielte. Atome von weniger häufigen Elementen werden dann mit den Präfixen aus Tabelle 3 und mit Lokanten für ihre Positionen in der angegebenen Reihenfolge benannt. Wenn ein Skelett die gleiche Anzahl von Atomen von mehr als einem Element, einschließlich Kohlenstoff, aufweist, wird Kohlenstoff als Stammelement bevorzugt. Wenn Kohlenstoff sich nicht unter den häufigsten Elementen des Skeletts befindet, wird als Stammelement das in Tabelle 3 zuerst genannte gewählt.

Wenn Teil I eine Wahl lässt, werden niedrigste Lokanten zuerst den Heteroatomen als vollständigem Satz und dann den Heteroatomen in der Reihenfolge von Tabelle 3 zugeordnet.

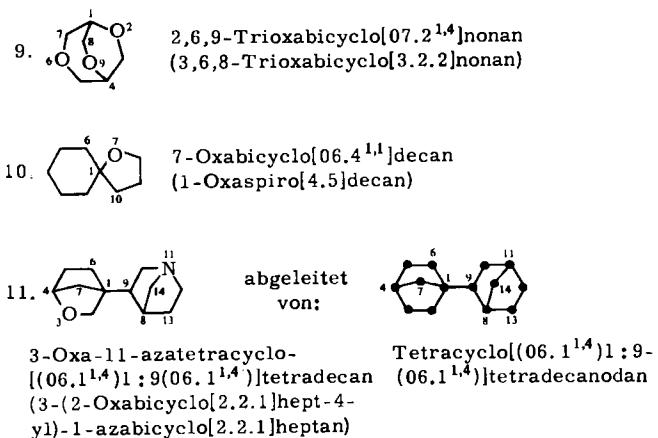
Beispiele (IUPAC-Namen^[5b,f] sind zum Vergleich in Klammern angegeben):

a) Gesättigte acyclische heteroatomare Verbindungen

1. $\text{CH}_3-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_3-\overset{\text{II}}{\text{O}}-\text{CH}_2-\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}_3$
2,5,8,11-Tetraoxa[13]tridecan
(2,5,8,11-Tetraoxatridecan)
2. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{O}}-\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{\text{IV}}{\text{O}}-(\text{CH}_2)_2-\overset{\text{V}}{\text{O}}-\text{CH}_2-\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{VIII}}{\text{C}}\text{H}_2$
2,6,9-Trioxa[11.2³]tridecan
(3-Ethyl-2,6,9-trioxaundecan)
3. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-(\text{CH}_2)_2-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}-(\text{CH}_2)_2-\overset{\text{IV}}{\text{S}}-(\text{CH}_2)_2-\overset{\text{V}}{\text{NH}}-\text{CH}_2-\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{VIII}}{\text{O}}$
13-Oxa-7-thia-10-aza[12.2⁴]tetradecan
(3-Propyl-2-oxa-6-thia-9-azaundecan)
4. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{O}}-\overset{\text{III}}{\text{NH}}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}-\text{CH}_2-\overset{\text{V}}{\text{S}}-(\text{CH}_2)_2-\overset{\text{VI}}{\text{O}}-\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_3$
 $\text{CH}_2-\overset{\text{VIII}}{\text{O}}-\text{CH}_3$
2,9,12-Trioxa-6-thia-3,15-daza[10.3⁴3⁴]hexadecan
(4-(Methoxymethyl)-4-[(methylamino)methyl]-2,9-dioxa-6-thia-3-azadecan)

b) Gesättigte cyclische heteroatomare Verbindungen

5.  1-Oxacyclopropan
(Oxiran)
6.  1-Azacyclopropan
(Aziridin)
7.  1-Oxa-2-thiacyclo[05]pentan
(1,2-Oxathiolan)
8.  4-Thia-1,2-diazacyclo[06]hexan
(1-Thia-3,4-diazinan)
(1-Thia-3,4-diazacyclohexan)



Regel N-12 – Ungesättigte Stammhydride: Namen, die von gesättigten Strukturen abgeleitet sind

N-12.1. Doppel- und Dreifachbindungen werden mit den üblichen Suffixen angezeigt, z.B. „-en“, „-dien“, „-in“, „-diin“, „-en...in“ etc. Anders als beim gegenwärtigen Usus wollen wir im Namen der ungesättigten Verbindung die Endung „-an“ der entsprechenden gesättigten Struktur beibehalten^[8]. Die Lokanten zweier Atome, die durch eine Mehrfachbindung verknüpft sind, werden unmittelbar vor das zuständige Suffix gesetzt und in aufsteigender Folge genannt, wobei der zweite Lokant in Klammern eingeschlossen wird. Der zweite Lokant wird weggelassen, wenn er den ersten nur um den Wert Eins überschreitet. Sofern Teil I und Regel N-11.3 eine Wahl lassen, werden niedrigste Lokanten Doppel- und Dreifachbindungen zuerst als vollständigem Satz zugeordnet, selbst wenn dies gegebenenfalls „-in“ einen niedrigeren Lokanten als „-en“ zuweist. Wenn noch eine Wahl bleibt, erhalten die Doppelbindungen die niedrigsten Lokanten.

Aus den in Regel N-11.2 angegebenen Gründen werden die systematischen IUPAC-Namen „Ethen“, „Ethin“, „Propen“, „Cyclopropen“, „Propadien“ und „Propin“ beibehalten.

Beispiele (IUPAC-Namen sind zum Vergleich in Klammern angegeben):

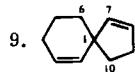
a) Ungesättigte acyclische Kohlenwasserstoffe^[5c]

1. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}_3$ [6]Hexan-2-en
(2-Hexen)
2. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{V}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}_2$ [6, 1³]Heptan-5-en
 $\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_3$
(4-Methyl-1-hexen)
3. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{V}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}_3$ [6, 1³]Heptan-3(7)-en
 $\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_2$
(2-Ethyl-1-penten)
4. $\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}_3-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{III}}{\text{C}}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{V}}{\text{C}}\text{H}_3$ [5, 2³]Heptan-2-en
 $\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{VII}}{\text{C}}\text{H}_3$
(3-Ethyl-2-penten)
5. $\text{CH}_2=\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{V}}{\text{C}}\text{H}_3$ [6]Hexan-1,4-dien
(1,4-Hexadien)
6. $\text{HC}\equiv\overset{\text{I}}{\text{C}}-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}_3$ [5]Pentan-3-en-1-in
(3-Penten-1-in)
7. $\text{CH}_2=\overset{\text{I}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{II}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{III}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{IV}}{\text{C}}\text{H}=\overset{\text{V}}{\text{C}}\text{H}-\overset{\text{VI}}{\text{C}}\text{H}$ [6]Hexan-1,3-dien-5-in
(1,3-Hexadien-5-in)

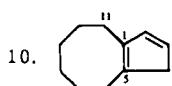
b) Ungesättigte cyclische Kohlenwasserstoffe^[5a]



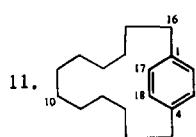
Cyclo[06]hexan
(Cyclohexen)



Bicyclo[06.4.1]dec-2,7-dien
(Spiro[4,5]deca-1,6-dien)

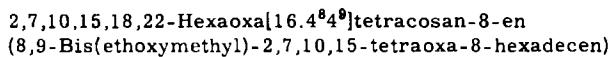
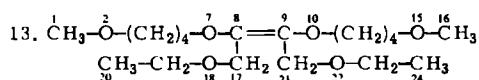
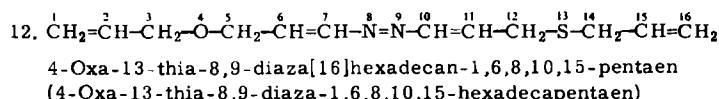


Bicyclo[011.0.1]undecan-1(5),2-dien
(4,5,6,7,8,9-Hexahydro-1H-cyclopentacycloocten)

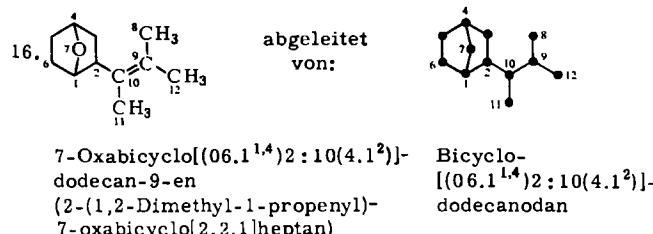
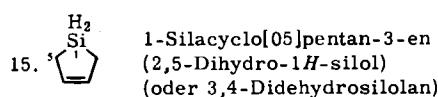
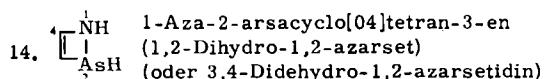


Bicyclo[016.2.1]octadecan-1,3,17-trien
(Bicyclo[12.2.2]octadeca-1(16),14,17-trien)

c) Ungesättigte acyclische heteroatomare Verbindungen^[5b]



d) Ungesättigte cyclische heteroatomare Verbindungen^[5c]

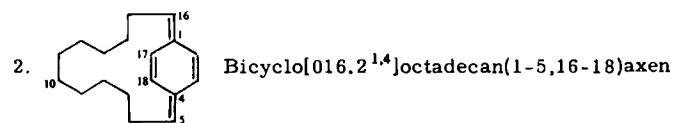
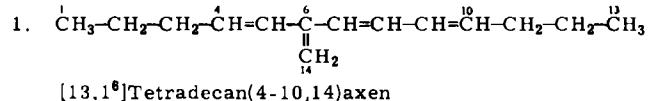


N-12.2. In einem komplizierteren Hydrid wird die Anwesenheit einer Teilstruktur mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen durch das Suffix „-axen“ angezeigt, das dem Namen des gesättigten Hydrids nachgestellt wird. Dieses Verfahren wird angewendet, wenn die Teilstruktur mindestens drei nichtkumulierte Doppelbindungen enthält.

Die Position der Unsaturation wird durch Lokanten angezeigt, die dem Suffix „-axen“ vorangestellt werden

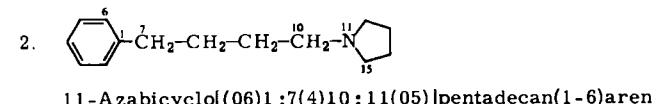
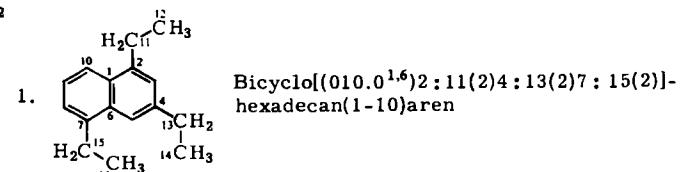
und alle in der (den) entsprechenden Teilstruktur(en) vorhandenen Skelettatome umfassen. Eine Gruppe von Lokanten wie (1-6) bedeutet, daß alle von 1 bis einschließlich 6 numerierten Atome einem Teil der Verbindung mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen angehören. Es kann auch mehr als ein Satz von Lokanten mit dem Suffix „-axen“ assoziiert sein.

Beispiele:



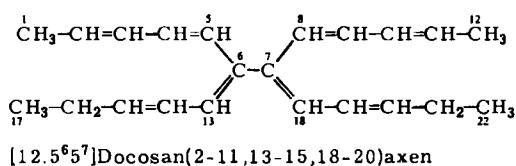
N-12.3. Wenn der aromatische Charakter einer Teilstruktur mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen hervorgehoben werden soll, kann das Suffix „-axen“ durch „-aren“ ersetzt werden.

Beispiele:



N-12.4. Wenn eine Wahl bleibt, erhalten die „-axen“- oder „-aren“-Suffixe die niedrigsten Lokanten. Alle Lokanten für die Atome der Teilstruktur mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen werden als ein Satz angesehen, ungeachtet der Tatsache, daß einige explizit genannt, andere lediglich impliziert werden, wie 3,4,5,6,7,8,9,10 in (2-11) im folgenden Beispiel.

Beispiel:

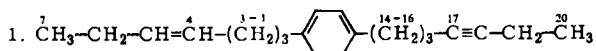


(nicht 2-10, 13-15, 18-21), denn 2...10, 11, 13... ist niedriger als 2...10, 13, 14)

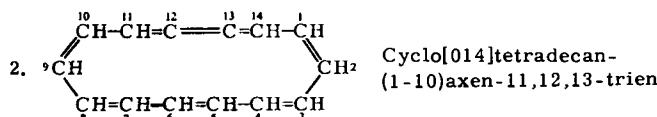
N-12.5. Wenn ein Teil einer Struktur die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen aufweist, während andere Teile entweder isolierte oder kumulierte Doppelbindungen und/oder Dreifachbindungen enthalten, werden die entsprechenden Suffixe in der Reihenfolge: „-axen“ (oder „-aren“), „-en“, „-in“ genannt. Lokanten kumulierter und isolierter Doppelbindungen werden gemeinsam angegeben, wenn man die „-axen“-Endung benutzt.

Wenn eine Wahl bleibt, werden niedrigste Lokanten gemäß **Regel N-12.4** zuerst den „-axen“- (oder „-aren“)-Suffixen zugeordnet, dann den explizit genannten Mehrfachbindungen als vollständigem Satz, dann Doppelbindungen.

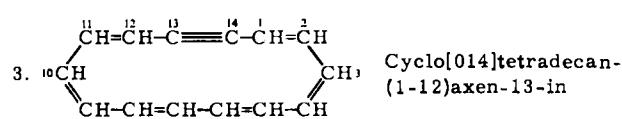
Beispiele:



Cyclo[$(7)1:8(06)11:14(7)$]icosan(8-13)aren-4-en-17-in

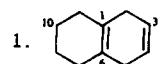


(nicht (5-14)axen-1,2,3-trien, denn das Suffix „-axen“ hat Anspruch auf die niedrigsten Lokanten)

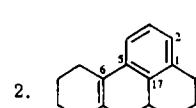


N-12.6. Wenn in einem „ortho-anellierten“ oder einem „ortho- und peri-anellierten“ polycyclischen Ringsystem die Zahl der Doppelbindungen gleich oder kleiner als zwei Drittel der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen ist, wird der Name aus dem Namen des entsprechenden gesättigten Ringsystems durch *Anfügung* der passenden „-en“, „-axen“- oder „-aren“-Suffixe (siehe Regeln N-12.2 und 12.3) nebst zugehörigen Lokanten an die Endung „-an“ gebildet.

Beispiele:



Bicyclo[010.0.0]decan-1(6),3-dien
(1,2,3,4,5,8-Hexahydronaphthalin)



Tetracyclo[016.1.5.0^6.11^0^13.17]-heptadecan-1,3,5(17),6(11)-tetraen
Tetracyclo[016.1.5.0^6.11^0^13.17]-heptadecan(1-6,11,17)axen
(5,6,6a,7,8,9,10,11-Octahydro-4H-benz[de]anthracen)

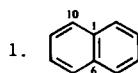
Regel N-13 - Ungesättigte Stammhydride:

Namen, die von Strukturen mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen abgeleitet sind (zum Teil alternativ zu Regel N-12)

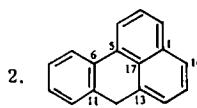
N-13.1. Der Name eines ungesättigten Hydrids mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen wird erhalten, indem man im Namen des entsprechenden gesättigten Hydrids die *Endung „-an“ durch das Suffix „-axen“ ersetzt*. Soll der aromatische Charakter des Hydrids angezeigt werden, wird das Suffix „-aren“ an Stelle von „-axen“ benutzt.

Die Anwesenheit mindestens eines Wasserstoffatoms an einem Skelettatom, das nur mit Einfachbindungen an angrenzende Skelettatome geknüpft ist, wird durch „indizierten Wasserstoff“ gekennzeichnet^[9].

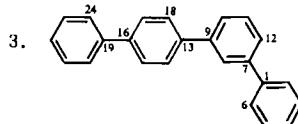
Beispiele:



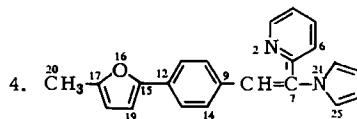
Bicyclo[010.0.0]deca-1,6-dien
(Naphthalin)



1,2H-Tetracyclo[016.1.5.0^6.11^0^13.17]-heptadecene
(7H-Benz[de]anthracen)



Tetracyclo[016.1.5.0^6.11^0^13.17]heptadecene

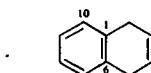


20H-16-Oxa-2,21-diazatetracyclo-[016.1.5.0^6.11^0^13.17]pentacosan

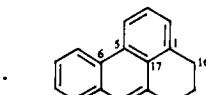
N-13.2. Ein ungesättigtes Hydrid, das eine Anzahl von Doppelbindungen enthält, die kleiner als die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen, aber größer als zwei Drittel dieser Zahl ist, kann durch Vorsetzen eines Präfixes „Dihydro-“, „Tetrahydro-“ etc. vor den Namen des entsprechenden Hydrids mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen benannt werden.

Indizierter Wasserstoff hat bei der Zuordnung niedrigster Lokanten den Vorrang vor „Hydro“-Präfixen. Zu diesem Zweck wird zuerst eine Struktur mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen ausgewählt, die den (die) niedrigsten Lokanten für indizierten Wasserstoff aufweist. Erst dann werden den Hydro-Präfixen niedrigste Lokanten zugewiesen. Diese Methode impliziert, daß ein Lokant für indizierten Wasserstoff größer sein kann als ein Hydro-Lokant (siehe Beispiel 4).

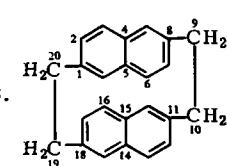
Beispiele:



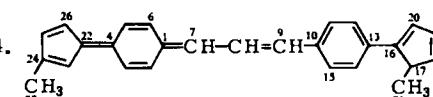
2,5-Dihydrobicyclo[010.0.0]deca-1,6-dien
(1,4-Dihydronaphthalin)



15,16-Dihydro-14H-tetracyclo-[016.1.5.0^6.11^0^13.17]heptadecene
(5,6-Dihydro-4H-benz[de]anthracen)

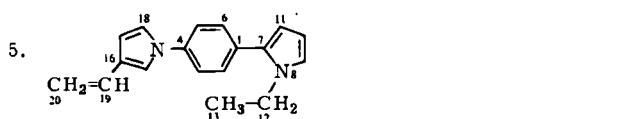


9,10,19,20-Tetrahydropentacyclo-[020.1.1^4.8^1.11.15^1.14.18]tetracosan



17,27-Dihydro-21H-tetracyclo-[016.1.5.0^6.11^0^13.17]heptacosan

(nur 21H und 27H entsprechen kanonischen Strukturen mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen; eine 17H-Struktur existiert nicht)

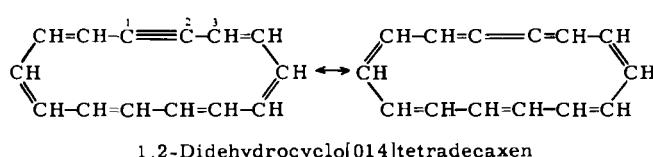


12,13-Dihydro-8,14-diazatricyclo-[10.6.1.0^{2,14}]icosaxene

N-13.3. Wenn ein Stammhydrid durch Verlust von Wasserstoff aus einer Struktur mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen gebildet wird, kann es durch Vorsetzen eines Präfixes wie „Didehydro-“, „Tetrahydro-“ etc. nebst geeigneten Lokanten vor den Namen des entsprechenden Hydrids mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen benannt werden.

Es wird empfohlen, „Hydro-“ und „Dehydro-“-Präfixe nicht im selben Namen zu benutzen. Strukturen, bei welchen dies nötig wäre, sollten gemäß Regel N-12 benannt werden. Bei der Zuordnung niedrigster Lokanten folgen „Dehydro-“-Präfixe unmittelbar auf indizierten Wasserstoff.

Beispiel (zu vergleichen mit Beispiel 2 und 3 von Regel N-12.5):



Regel N-14 – Konstruktion des Namens

N-14.1. Die Teile des Namens werden wie folgt angeordnet:

- a) Substituenten-Präfixe in alphabetischer Reihenfolge;
- b) Name des neutralen Stammhydrids einschließlich
 - 1) Dehydro- und Hydro-Präfixen;
 - 2) indiziertem Wasserstoff;
 - 3) Austausch-Präfixen in der gleichen Reihenfolge wie in Tabelle 3;
 - 4) Name des Strukturgraphen, in welchem die Endung „-nodan“ durch ein Affix ersetzt ist, das das Stammelement kennzeichnet (Regel N-11);
 - 5) Endungen für die Unsättigung („-en“, „-in“, „-axen“, „-aren“);
- c) entweder Suffix(e) für Ladungen und/oder freie Valenzen in der Reihenfolge „-ium“, „-ylium“, „-id“, ein Suffix für den anionischen vorrangigen Substituenten (Regel N-10.4), „-yl“;
 - oder ein Suffix für den neutralen vorrangigen Substituenten (Regel N-10.2).

Suffixe für freie Valenzen („-yl“, „-diyl“ etc.) werden immer am Ende des Namens genannt. Sie schließen die Anwesenheit eines Suffixes für einen neutralen vorrangigen Substituenten aus. In der Nodainomenklatur wird „-yl“ etc. ausschließlich zur Kennzeichnung freier Valenzen und als Endung der Präfixe für Substituenten verwendet, die keiner internen Numerierung bedürfen (z. B. Regel N-10.3: Dichlor-³λ-iodanyl).

Die in Regel N-10.4 definierten anionischen vorrangigen Substituenten werden nach den anderen ionischen Suffixen genannt. Ist mehr als eine Art anionischer Substituenten vorhanden, bestimmt Regel N-10.4, welcher davon

als Suffix benannt wird. Die anderen anionischen Substituenten werden dann mit den in Regel N-10.3 angegebenen Präfixen belegt.

Nur eine Art neutraler Substituenten kann als Suffix benannt werden (vorrangiger Substituent). Wenn eine Wahl bleibt, gilt als vorrangiger Substituent der in Tabelle 2 zuerst genannte. Die Rangfolge von Substituenten, die in dieser Tabelle nicht genannt sind, wird durch die betreffenden IUPAC-Regeln wie C-10.4, C-641.2, D-1.31, D-1.32 und D-1.33^[5] festgelegt.

Atome oder Gruppen, die nicht durch ein Suffix oder Präfix als Substituenten gekennzeichnet werden können, werden als Teil eines neutralen Stammhydrids ausgedrückt.

Beispiele:

1. $\text{OCH}_2\text{--CH}_2\text{--COOH}$ 3-(Hydroxy,oxo)propan-1-yl
 2. $\text{H}_2\text{N} \begin{array}{c} \text{CH}_2\text{--CH}_2 \\ | \\ \text{CH} \end{array} \text{--COO}^\ominus$ 4-Azacyclo[(06)1:7(1)]heptan-4-ium-7-oat
 3. $\text{HO}_2\text{S} \begin{array}{c} \text{CO} \text{---} \text{O} \text{---} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{C}_6\text{H}_4 \\ || \\ \text{CO}_2\text{H} \end{array}$ 7-Oxo-5-sulfino-8-oxacyclo-[10(6)1:7(3)2:10(1)]decane-10-säure
- (gemäß Tabelle 2 hat (C)OOH Vorrang vor SO₂H)

N-14.2. Nach Teil I^[2] und den voranstehenden Regeln wird die Numerierung jeder Struktur durch folgende Kriterien bestimmt, die nacheinander angewendet werden, bis eine Entscheidung erreicht ist:

- a) Die in Teil I gegebenen Kriterien für die Numerierung des Strukturgraphen;
- b) niedrigste Lokanten für die Austausch-Präfixe als vollständigen Satz (Regel N-11.3);
- c) niedrigste Lokanten für die in Tabelle 3 zuerst aufgeführten Austausch-Präfixe (Regel N-11.3).

Je nachdem, ob Regel N-12 oder N-13 zur Anzeige der Unsättigung verwendet wird, werden Unsättigungs-Affixen auf einem der beiden folgenden Wege Lokanten zugewiesen:

(Regel N-12) – In Namen, die von denen gesättigter Strukturen abgeleitet sind, werden niedrigste Lokanten zugeordnet:

d₁) „-axen“- oder „-aren“-Suffixen (Regeln N-12.4 und N-12.5);

e₁) Explizit genannten Mehrfachbindungen als vollständigem Satz, dann Doppelbindungen (Regeln N-12.1 und N-12.5).

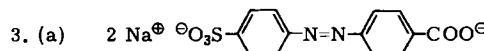
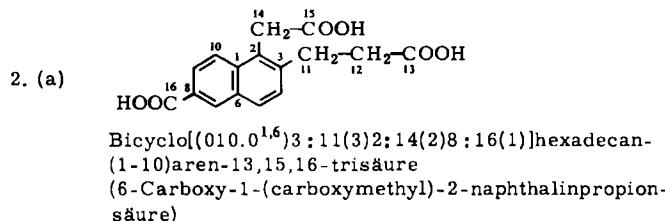
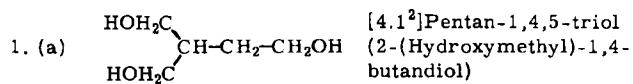
(Regel N-13) – In Namen, die von denen für Strukturen mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen abgeleitet sind, werden niedrigste Lokanten zugeteilt:

d₂) Indiziertem Wasserstoff (Regeln N-13.1 und N-13.2);

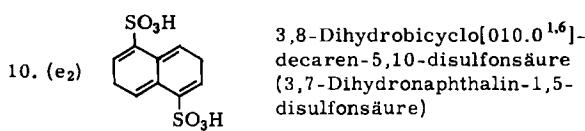
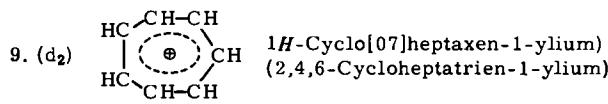
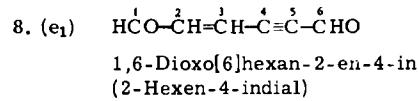
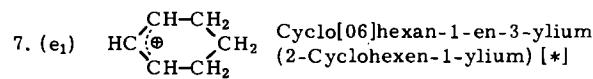
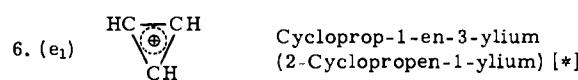
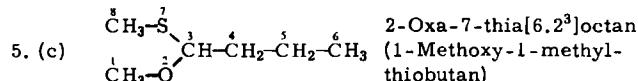
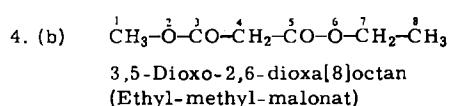
e₂) „Hydro-“- oder „Dehydro-“-Präfixen (Regeln N-13.2 und N-13.3), wobei es sich von selbst versteht, daß

diese beiden Präfix-Typen nicht im selben Namen vorkommen dürfen.

Beispiele: (Entscheidungskriterien sind in Klammern angegeben):



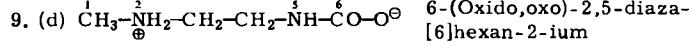
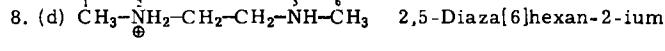
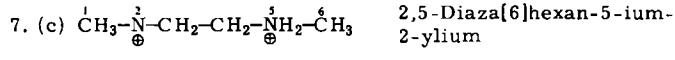
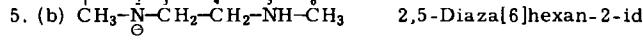
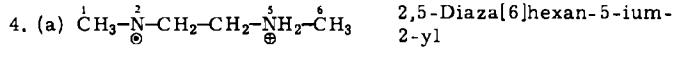
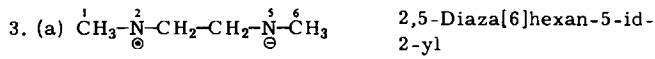
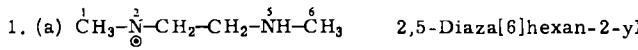
Dinatrium-4-sulfonato-7,8-diaza-15*H*-bicyclo-[
(06)1:7(2)8:9(06)12:15(1)]pentadecaxen-15-oat
(Dinatrium-4¹-sulfonatoazobenzol-4-carboxylat
oder: Dinatrium-*p*-(*p*-sulfonatophenylazo)benzoat)



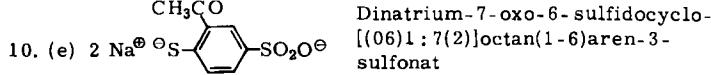
N-14.3. Wenn Teil I und Regel N-14.2 bei der Numerierung des Skeletts einer chemischen Struktur eine Wahl lassen, werden die folgenden Kriterien nacheinander angewendet, bis eine Entscheidung erreicht ist, wobei niedrigste Lokanten gegeben werden an

- mit dem Suffix „-yl“ gekennzeichnete freie Valenzen;
- mit dem Suffix „-id“ gekennzeichnete anionische Skelettatome;
- kationische Skelettatome, die mit dem Suffix „-ylium“ gekennzeichnet sind, was dem Verlust eines Elektrons an der Position einer freien Valenz entspricht;
- kationische Skelettatome, die mit dem Suffix „-ium“ gekennzeichnet sind, was der Anbindung eines Protons entspricht;
- mit einem Suffix benannte anionische Substituenten (siehe Regel N-10.4);
- mit einem Präfix benannte anionische Substituenten (siehe Regel N-10.4);
- mit einem Präfix benannte kationische Substituenten (siehe Tabelle 1).

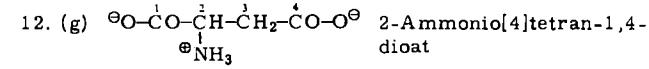
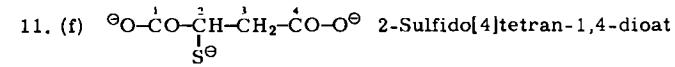
Beispiele (Entscheidungskriterien sind in Klammern gegeben):



(da ionische Skelettatome den Vorrang für niedrige Lokanten gegenüber ionischen Substituenten haben, ist es sinnvoll, Präfixe für letztere zu verwenden)



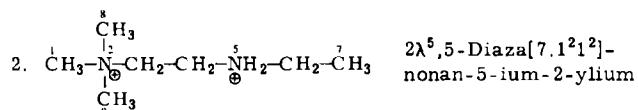
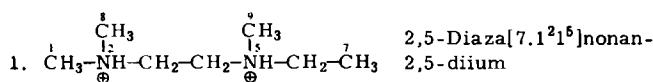
(der vorrangige Substituent SO₃⁻ hat den Lokanten 3, nicht 5)



[*] Wie in der klassischen organischen Nomenklatur können freie Radikale mit delokalisierten freien Valenzen oder Ionen mit delokalisierten Ladungen durch willkürliche Wahl einer lokalisierten Form benannt werden, z. B. 2-Cyclohexen-1-ylium (Regel C-83.1 [5]). Wenn dieses Verfahren in der Nodalnomenklatur angewendet wird, muß beachtet werden, daß das neutrale Stammhydrid einschließlich Unsaättigung den Vorrang für niedrige Lokanten gegenüber Ladungen hat. Die hier gewählte willkürliche Numerierung kann sich daher von der in den IUPAC-Regeln empfohlenen willkürlichen Numerierung unterscheiden (siehe Beispiele 6 und 7). Da IUPAC-Regeln für derartige Spezies vorbereitet werden, soll dieser Gegenstand hier nicht behandelt werden.

N-14.4. Die Beschreibung des Skeletts wird abgeschlossen, bevor die Verteilung der Wasserstoffatome und Ladungen berücksichtigt wird. Deshalb darf ein kationisches Skelettatom nur dann mit dem Suffix „-ium“ gekennzeichnet werden, wenn es mindestens ein Wasserstoffatom trägt. Ist dies nicht der Fall, wird das Suffix „-ylium“ gemeinsam mit der Angabe einer normwidrigen Bindungszahl in Form eines λ^n -Symbols benutzt^[7].

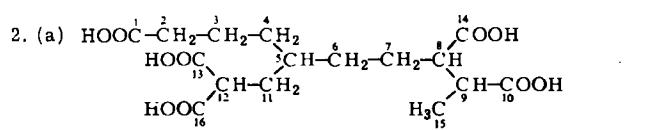
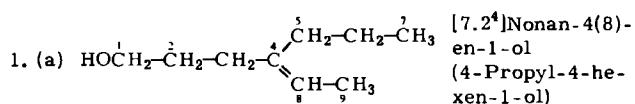
Beispiele:



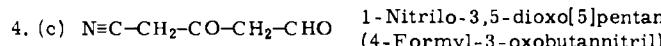
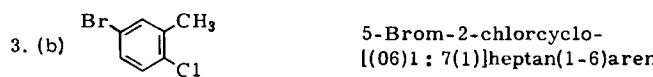
N-14.5. Wenn die vorstehenden Regeln bei der Nummerierung des Skeletts einer chemischen Struktur eine Wahl lassen, werden die folgenden Kriterien nacheinander angewendet, bis eine Entscheidung erreicht ist, wobei niedrigste Lokanten gegeben werden, an

- a) den mit dem Suffix gekennzeichneten neutralen vorangegangenen Substituenten;
 - b) mit Präfixen gekennzeichnete neutrale Substituenten als vollständigen Satz;
 - c) mit Präfixen gekennzeichnete neutrale Substituenten in alphabetischer Reihenfolge.

Beispiele (Entscheidungskriterien sind in Klammern angegeben):



[10.3⁵1⁸1⁹1¹²]Hexadecan-1,10,13,14,16-pentasäure
(3-(3-Carboxypropyl)-1,1,6,7-octantetracarbonsäure)



6. Schlußfolgerung

Wir haben gezeigt, daß die Verwendung der Nodalnomenklatur (mit ihren Strukturgraphen, ihrer mathematischen Beschreibung chemischer Strukturen, ihrer eindeutigen fortlaufenden Numerierung und ihrer tatsächlichen Gleichwertigkeit von Substituenten und charakteristischen Gruppen) die Benennung chemischer Substanzen, vor allem organischer Verbindungen mit komplizierten Strukturen, vereinfacht. Die resultierenden Namen basieren auf

einer einzigen Numerierungssequenz; dadurch wird eine Verstreuung von Substituenten-Affixen und Austauschtermini über den Namen vermieden.

Der vorliegende Beitrag vermittelt lediglich recht allgemeine Anregungen zur Anpassung der substitutiven Methode an die Nodalnomenklatur; eine ausführlichere und detailliertere Behandlung funktioneller Gruppen mag weiterer Studien wert sein. Auch beabsichtigen wir die Ausweitung der Nodalnomenklatur auf andere Typen chemischer Substanzen, z. B. mehrkernige Koordinationsverbindungen.

Die Autoren möchten den Mitgliedern der „IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry“ für ihre Kommentare und, insbesondere, Professor D. Hellwinkel für die Übersetzung dieser Arbeit ins Deutsche danken.

Eingegangen am 7. März,
in veränderter Fassung am 22. Juni 1983 [A 480]
Übersetzt von Prof. Dr. Dieter Hellwinkel, Heidelberg

Anmerkung zu Teil I^[2]

Die Überprüfung der Regeln N-5.3 bis N-5.34 zeigte, daß die Auswahlkriterien zur Numerierung und Benennung von Verbänden einfacher und umfassender gestaltet werden können. Daher wurden die im folgenden als RN-5.3 bis RN-5.34 bezeichneten Regeln entwickelt, die die früheren Regeln N-5.3 bis N-5.34 ersetzen sollen.

Dieser neue Text gibt, wenn auch zuweilen in unterschiedlicher Anordnung, viele Kernpunkte des früheren Textes wieder (einschließlich Anmerkung^[23]). Die Namen der Beispiele werden von den Änderungen nicht beeinflußt.

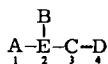
RN-5.3. Die *Numerierung des Modulranggraphen*, d.h. die Zuordnung der Modulrangzahlen, welche die Reihenfolge der endgültigen fortlaufenden Numerierung des Verbandes bestimmt (siehe Regel N-5.1), beginnt mit dem Hauptmodul (siehe Regel N-4.2) und läuft nacheinander über jede an das Hauptmodul geknüpfte Kette von Kontraktionsnodi. Die Auswahlregeln zur Numerierung des Modulranggraphen unterscheiden sich von denen zur Numerierung acyclischer Graphen (Regel N-1), da Modulranggraphen Baueinheiten (Module) betreffen, deren strukturelle Komplexität stark variieren kann. Dementsprechend berücksichtigen die Regeln für den Modulranggraphen die Natur der Kontraktionsnodi, während gemäß Regel N-1 die Natur der Nodi keinen Einfluß auf die Numerierung des Graphen hat.

RN-5.31. Man betrachtet einen Modulranggraphen als aus einer oder mehreren *unverzweigten Kette(n)* von Modulen gebildet, welche *Segmente* genannt und wie folgt definiert werden.

RN-5.311. Die Numerierung des Modulranggraphen beginnt an dem (einem der) *Hauptmodul* genannten ranghöchsten Modul(e) und wird fortlaufend gemäß nachstehendem Verfahren weitergeführt:

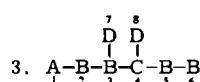
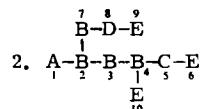
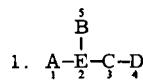
a) In einer an das Hauptmodul gebundenen Kette von Modulen bildet das längste (oder eines der längsten) an das Hauptmodul geknüpfte(n) Segment(e) das *Hauptsegment*, das fortlaufend nach dem Hauptmodul numeriert wird.

Beispiel:



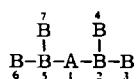
- b) Andere Segmente einer Modulkette werden fortlaufend numeriert, wobei man immer mit dem (einem der) längsten an ein bereits numeriertes Modul gebundenen Segment(e) beginnt. Gleichlange Segmente werden gemäß der ansteigenden numerischen Folge ihrer Verknüpfungslokanten numeriert.

Beispiele:



- c) Jede an das Hauptmodul gebundene unverzweigte oder verzweigte Modulkette wird vollständig numeriert, bevor eine andere an das Hauptmodul gebundene Kette (so vorhanden) numeriert wird.

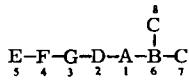
Beispiel:



- RN-5.312.** Wenn zwei oder mehr Modulketten an das Hauptmodul geknüpft sind, wird die Reihenfolge der Numerierung dieser Ketten durch die folgenden Kriterien bestimmt, die nacheinander angewendet werden, bis eine Entscheidung erreicht ist:

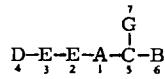
- a) Größte Zahl von Modulen in der gesamten Kette.

Beispiel:



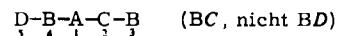
- b) Längste unverzweigte Kette von Modulen (d. h. längstes Hauptsegment).

Beispiel:



- c) Ranghöchstes Modul an der Stelle der ersten Abweichung, wenn die Modulsätze Term für Term in der nach **Regel N-4.3** definierten absteigenden Rangfolge verglichen werden, unabhängig von den Positionen der Module in den Ketten.

Beispiel:



- RN-5.313.** Wenn ein Modulranggraph zwei oder mehr Module höchsten Ranges, d.h. mit dem Modulrangdeskriptor A, aufweist, ist das *Hauptmodul* dasjenige ranghöchste Modul, an das die ranghöchste Kette von Kontraktionsnodi geknüpft ist. Dazu werden diese Ketten Term für Term in absteigender Rangfolge verglichen, wobei diese Folge durch die in **Regel RN-5.312** beschriebenen Kriterien festgelegt ist.

Beispiele:

- 1.

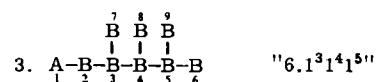
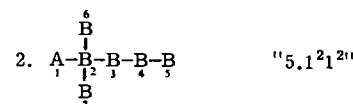
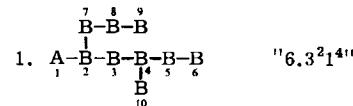
- 2.

- 3.

- 4.

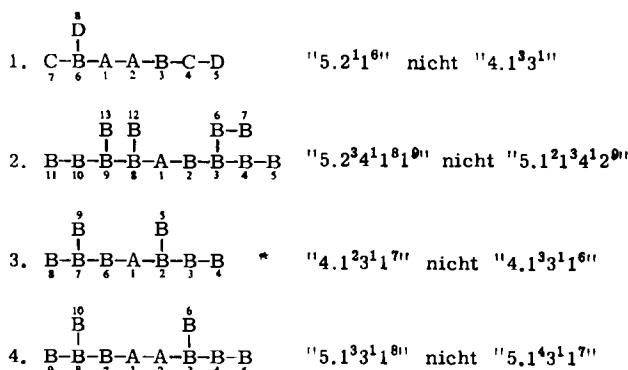
- RN-5.32.** Der *Modulgraphdeskriptor* besteht aus Anführungszeichen, die folgendes einschließen: a) eine arabische Ziffer, die die Zahl der Module, einschließlich des Hauptmoduls, im ersten zu numerierenden Segment (Hauptsegment) angibt; b) einen Punkt, gefolgt von arabischen Ziffern, welche die Zahl der Module in jedem Segment angeben und in der Reihenfolge der Numerierung der Module angeführt werden; c) einen hochgestellten Lokanten für jedes unter b) definierte Segment, der das Modul im bereits numerierten Teil des Graphen anzeigen, an welches das betreffende Segment geknüpft ist.

Beispiele:



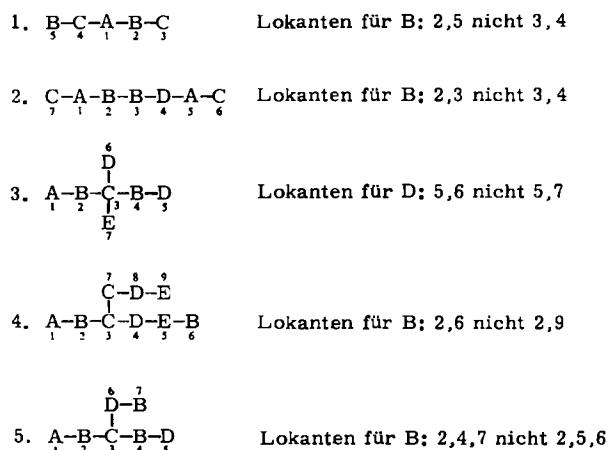
- RN-5.33.** Wenn bei der Kettennumerierung oder bei der Bestimmung des Hauptmoduls eine Wahl bleibt, ist diejenige Numerierung des Modulranggraphen korrekt, die dem Modulgraphdeskriptor mit einer bevorrechtigten Zahl an der Stelle der ersten Abweichung entspricht: Bezieht sich die erste Abweichung auf eine Segmentlänge, ist die höhere Zahl bevorrechtigt; bezieht sich die erste Abweichung auf einen hochgestellten Modullokanten, ist die niedrigere Zahl bevorrechtigt.

Beispiele:



RN-5.34. Wenn bei der Numerierung noch eine Wahl bleibt, ist diejenige Numerierung korrekt, die an der Stelle der ersten Abweichung den niedrigsten Lokanten aufweist, sofern die Module in abfallender Rangfolge berücksichtigt werden.

Beispiele:



Regel N-5.35 und die folgenden Regeln bleiben unverändert.

Eingegangen am 17. Oktober 1983 [A480a]
Übersetzt von Prof. Dr. Dieter Hellwinkel, Heidelberg

- [1] Detaillierte Diskussion mathematischer Beschreibungen chemischer Strukturen siehe A. L. Goodson, Recent Advances in Chemical Nomenclature and their Applications to Theoretical and Preparative Chemistry - IUPAC International Symposium on Theoretical Chemistry, Dubrovnik 1982; *Croat. Chem. Acta* 56 (1983) 315.
- [2] N. Lozac'h, A. L. Goodson, W. H. Powell, *Angew. Chem.* 91 (1979) 951; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 18 (1979) 887; a) *ibid.* Abschnitt 4.
- [3] A. T. Balaban: *Chemical Applications of Graph Theory*, Academic Press, London 1976.
- [4] A. L. Goodson, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 20 (1980) 167; „Nomenclature of Chemical Compounds“, in N. N. Tyutulyukov, D. Bonchev: *Graph Theory and its Application in Chemistry*, Nauka i Izdatelstvo, Sofia, im Druck.
- [5] IUPAC, Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H, Pergamon Press, Oxford 1979; a) *ibid.* S. 82 und Abschnitt D-0.3; b) *ibid.* Abschnitt C-0.6; c) *ibid.* Regel B-1; d) *ibid.* Regel D-4.11 und Tabelle I, S. 459; e) *ibid.* Abschnitt A; f) *ibid.* Abschnitt B.
- [6] Eine Verallgemeinerung der Austauschnomenklatur wurde von der „IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry“ erwogen; unveröffentlichte Studien zu einer strukturell begründeten substitutiven Nomenklatur, 1975-1977.
- [7] IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, „The Designation of Nonstandard Classical Valence Bonding in Organic Chemistry“, *Pure Appl. Chem.* 54 (1982) 217.
- [8] Erstmals vorgeschlagen von der IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry Working Party on Section G.
- [9] Diese Definition schließt die von Regel A-21.6 [5] abgedeckten Fälle ein, ist aber allgemeiner und gilt sogar, wenn indizierter Wasserstoff zur Unterscheidung von Isomeren nicht notwendig ist. Diese Definition wurde von der IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry in der „Revision of the Extended Hantzsch-Widman System of Nomenclature for Heteromonocycles (Recommendations 1982)“, Regel RB-1.2, *Pure Appl. Chem.* 55 (1983) 409, übernommen.