

Erweiterung und Revision des von-Baeyer-Systems zur Benennung polycyclischer Verbindungen (einschließlich bicyclischer Verbindungen)**

Die Übersetzung basiert auf der „Extension and Revision of the von Baeyer System for Naming Polycyclic Compounds (Including Bicyclic Compounds)“ der Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (III.1) der Organic Chemistry Division der International Union of Pure and Applied Chemistry, veröffentlicht in *Pure Appl. Chem.* **1999**,

71, 513–529. Sie ist auch im Internet unter der Adresse <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/vonBaeyer/> zugänglich. Das Original wurde von G. P. Moss (Queen Mary University, London) für die Veröffentlichung vorbereitet.

Obmann und Übersetzer: Dr. Karl-Heinz Hellwich*

Der Working Party (1992–1998) gehörten folgende Personen an: P. M. Giles, Jr. (USA), E. W. Godly (Großbritannien), K.-H. Hellwich (Deutschland), A. K. Ikitzler (Türkei), M. V. Kisakürek (Schweiz), A. D. McNaught (Großbritannien), G. P. Moss (Großbritannien), J. Nyitrai (Ungarn), W. H. Powell (USA), O. Weißbach (Deutschland), A. Yerin (Rußland).

Die Commission on Nomenclature of Organic Chemistry umfasste während der Vorbereitung dieses Berichts folgende Personen: Titularmitglieder: J. Blackwood (1996–1997), H. J. T. Bos (1987–1995, stellvertretender Vorsitzender 1991–1995), B. J. Bossebroek (ab 1998), J. R. Bull (1987–1993), F. Cozzi (ab 1996), H. A. Favre (ab 1989, Vorsitzender ab 1991), P. M. Giles, Jr. (1989–1995), E. W. Godly (1987–1993, Schriftführer 1989–1993), B. J. Herold (1994–1997), M. V. Kisakürek (1994–1997, stellvertretender Vorsitzender 1996–1997), D. Tavernier (1991–1995), J. G. Traynham (ab 1991, Schriftführer ab 1994), J. L. Wiśniewski (ab 1991); assoziierte Mitglieder: F. Cozzi (1994–1995), F. Fariña† (1989–1994), A. A. Formanovsky (ab 1998), P. Grünanger (1987–1993), K.-H. Hellwich (ab 1998), B. J. Herold (ab 1998), R. J.-R. Hwu (1989–1997), M. A. C. Kaplan (1989–1997), M. V. Kisakürek (1987–1993, ab 1998), A. J. Lawson (ab 1991), W. Liebscher (1989–1997), M. Mikołajczyk (1989–1997), J. Nyitrai (ab 1994), C. Schmitz (1989–1993), H. A. Smith, Jr. (ab 1994), J. H. Stocker (ab 1991), D. Tavernier (1987–1991, 1996–1997), S. S.-C. Tsay (ab 1998), A. Yerin (ab 1998); Ländervertreter: R. Bicca de Alencastro (Brasilien, 1994–1997), S. Chandrasekaran (Indien, 1994–1995), Q.-Y. Chen (China, ab 1991), G. Déák† (Ungarn, 1979–1992), A. A. Formanovsky (Rußland, 1996–1997), M. J. Gašić (Jugoslawien, 1989–1993), E. W. Godly (Großbritannien, 1994–1997), B. J. Herold (Portugal, 1991–1993), S. Ikegami (Japan, ab 1986), A. K. Ikitzler (Türkei, 1987–1997), J. Kahovec (Tschechische Republik, ab 1989), P. Kristian (Slowakei, 1994–1997), Eun Lee (Republik Korea, ab 1994), X. T. Liang (China, 1987–1993), L. Maat (Niederlande, 1989–1991, ab 1996), G. P. Moss (Großbritannien, ab 1998), J. Nyitrai (Ungarn, 1992–1993), L. J. Porter (Neuseeland, 1987–1995), J. A. R. Rodrigues (Brasilien, ab 1998), A. Varvoglis (Griechenland, 1991–1993), M. S. Wadia (Indien, ab 1996).

[*] Dr. K.-H. Hellwich
Beilstein Chemiedaten und Software GmbH
Trakehner Straße 7–9, 60487 Frankfurt (Deutschland)
Fax: (+49) 69-716731-19
E-mail: khellwich@beilstein-cds.de

[**] Copyright© der englischen Fassung: International Union of Pure and Applied Chemistry, 1999. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation sowie Dr. G. P. Moss für die elektronische Fassung des englischen Manuskripts. – Anmerkung zu dieser Übersetzung: Hier werden einige Gepflogenheiten des Chemical Abstracts Service (CAS) und des Beilstein-Instituts erwähnt. Dies geschieht nur informationshalber, es handelt sich also in solchen Fällen nicht notwendig um Empfehlungen der Kommission. Des Weiteren wurden Unstimmigkeiten des Originals bereinigt, ohne dass darauf immer explizit hingewiesen wird.

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Allgemeinsprache essentiell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die letzte Übersetzung erschien in Heft 14/2002, die nächste (Erweiterung und Revision der Nomenklatur für Spiroverbindungen) ist für Heft 20/2002 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

Diese Empfehlungen dokumentieren das in den Regeln A-31, A-32 und B-14 in *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H*^[6] und in der Regel R-2.4.2 in *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds*^[7] beschriebene von-Baeyer-System zur Benennung polycyclischer Ringsysteme und erweitern es für kompliziertere Fälle. Sie geben Anleitung zur Benennung von Ringsystemen, die von den Regeln bisher nicht erfasst wurden. Die Vorgehensweise ist, den Hautring und die Hauptbrücke zu ermitteln, die das zugrunde liegende bicyclische System bilden, und die betreffenden Atome zu nummerieren. Danach werden alle weiteren Brücken, ob sie zusätzliche Atome enthalten oder nicht, durch die Angabe nicht nur der Zahl ihrer Atome, sondern auch der beiden Brückenkopfatome gekennzeichnet. Der vollständige Name zeigt auch die Zahl der Ringe und die Gesamtzahl der Gerüstatome im Ringsystem an. Heteroatome, Unsättigung und Substituenten werden in der üblichen Weise angegeben.

Das hier beschriebene System zur Benennung polycyclischer Verbindungen wurde von von Baeyer^[1] für bicyclische Verbindungen entwickelt und von Buchner und Weigand^[2] für tricyclische Systeme erweitert. Patterson^[3] übernahm die von-Baeyer-Nomenklatur in seiner Arbeit zur Ringnomenklatur für die IUPAC. Sie wurde im *Ring Index*^[4] und im *Index Guide, Appendix IV*^[5] ¶155, 161, 184, des Chemical Abstracts Service verwendet. Die IUPAC erweiterte die von-Baeyer-Nomenklatur in den derzeitigen Regeln, wie folgende Aufstellung zeigen soll: Regeln A-31, A-32 (Kohlenwasserstoffe), B-14 (heterocyclische Verbindungen), B-6.1, C-514.4, C-551.2, D-6.24 (Siloxane), D-6.33 (Silathiane), D-6.43 (Silazane), D-6.51 (Silazan-Radikale), D-6.71 (Organosiliciumverbindungen), D-7.51 (Organoborverbindungen), D-7.54 (Borazane),^[6] R-2.4.2, R-5.8.1.1, R-5.8.1.2, R-5.8.2, R-7.1.1,^[7] die λ -Konvention (Regel Lm-2.0^[8]) und RC-81.1.3.3 (Radikale und Ionen).^[9] Mängel in den Regeln wurden von Eckroth^[10] sowie Rücker und Rücker^[11] aufgezeigt. Mit diesem Dokument sollen solche Mängel behoben werden. Es ersetzt die bestehenden Regeln A-31, A-32 und B-14^[6] sowie R-2.4.2.^{[7],*[8]}

In den nachfolgenden Beispielen gilt die angegebene Nummerierung für den regelgerechten Namen, soweit nichts anderes angegeben ist. Bei der Benennung polycyclischer Ringsysteme nach dem von-Baeyer-System werden die folgenden Regeln der Reihe nach so lange angewendet, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

VB-1: Definitionen und Begriffe

Brückenkopf:

Ein Gerüstatom des Ringsystems, das an drei oder mehr Gerüstatome (außer Wasserstoff) gebunden ist.

[*] Im englischen Original ist die Regel R-2.4.2 an dieser Stelle nicht genannt. Wie jedoch aus dem Zusammenhang, insbesondere dem Inhalt von Regel VB-7 hervorgeht, muss sie ergänzt werden.^[16]

Brücke:

Eine unverzweigte Kette von Atomen, ein Atom oder eine Valenzbindung, die zwei Brückenköpfe miteinander verbinden.

Hauptbrückenkopf:

Diese zwei Brückenköpfe müssen durch mindestens drei Brücken (die Brückenköpfe für Nebenbrücken enthalten können) verknüpft sein. Kein Atom gehört mehr als einer Brücke an.^[*]

Hautring:

Er wird gemäß VB-2 ermittelt und enthält die beiden Hauptbrückenköpfe.

Hauptbrücke:

Sie verbindet die beiden Hauptbrückenköpfe.

Nebenbrücke:

Jede Brücke, die nicht im Hautring oder in der Hauptbrücke enthalten ist.

Unabhängige Nebenbrücke:

Sie verbindet Brückenköpfe, die Bestandteil des Hautrings oder der Hauptbrücke sind.

Abhängige Nebenbrücke:

Sie ist an mindestens einen Brückenkopf, der sich in einer Nebenbrücke befindet, gebunden.

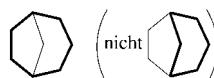
Polycyclisches System:

Für die Zahl der Ringe eines polycyclischen Systems gilt, dass sie gleich der geringsten Zahl an Bindungsbrüchen ist, die nötig sind, um das System in eine offenkettige Verbindung umzuwandeln. Die Zahl der Ringe wird durch das entsprechende Präfix, Bicyclo (nicht Dicyclo), Tricyclo, Tetracyclo usw., angegeben.

VB-2: Der Hautring

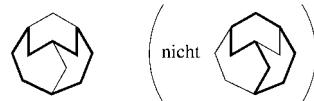
Der Hautring wird so gewählt, dass er möglichst viele Gerüstatome der polycyclischen Verbindung enthält. In den Beispielen zu den Regeln VB-2 bis VB-4 ist der Hautring fett wiedergegeben.

Beispiele:



Bicyclo[3.2.1]octan

nicht Bicyclo[3.1.2]octan (siebengliedriger Hautring ist größer als sechsgliedriger)



Tricyclo[4.4.1.1^3,9]dodecan

nicht Tricyclo[4.3.2.1^3,8]dodecan (zehngliedriger Hautring ist größer als neungliedriger)

[*] Diese Formulierung ist nicht sehr glücklich gewählt, da nach dem Entfernen der Brücke (Hauptbrücke) aus einem Bicyclus ein einfacher Monoclyclus verbleibt, von dem niemand sagen würde, er bestehe aus zwei Brücken. Es ist daher zu empfehlen, von den beiden Zweigen des Hautrings und der Hauptbrücke zu sprechen.

VB-3: Benennung bicyclischer Kohlenwasserstoffe

Der Name eines bicyclischen Systems (so ein System besteht nur aus dem Hautring und der Hauptbrücke) wird aufgebaut aus:

- dem Präfix Bicyclo (das die Zahl der Ringe anzeigt);
- Zahlen, die die Brückenlängen angeben (d. h. die Zahl der Gerüstatome ohne die Brückenkopfatome); diese werden in der Reihenfolge abnehmender Größe angeführt, durch Punkte getrennt und in eckige Klammern eingeschlossen (z.B. [3.2.1]);
- dem Namen des Kohlenwasserstoffs, der die Gesamtzahl der Gerüstatome anzeigt.

Beispiel:

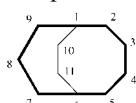


Bicyclo[3.2.1]octane

VB-4: Nummerierung bicyclischer Systeme

Die Atome eines bicyclischen Systems werden fortlaufend mit ganzen Zahlen in lückenlos aufsteigender Reihenfolge ausgehend von einem Brückenkopfatom auf dem längsten Weg zum zweiten Brückenkopfatom nummeriert. Danach wird die Nummerierung um den Hautring herum fortgesetzt. Schließlich werden die Atome der Hauptbrücke – beginnend am niedriger nummerierten Brückenkopfatom – nummeriert.

Beispiel:



Bicyclo[4.3.2]undecane

VB-5: Die Hauptbrücke

Bei einem mindestens tricyclischen System wird die Hauptbrücke so gewählt, dass sie möglichst viele der Atome enthält, die nicht Teil des Hautrings sind. Sie ist ebenso wie der Hautring in den Beispielen zu den Regeln VB-5 bis VB-7 fett wiedergegeben.

Beispiel:



Tricyclo[3.2.1.0^2.4]octane

nicht Tricyclo[4.1.0.1^2.5]octan (Hauptbrücke mit einem Atom ist länger als eine Brücke ohne Atom)

VB-6: Benennung polycyclischer Kohlenwasserstoffe

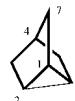
Alle Ringe eines Polycyclus, die nicht Teil des bicyclischen Grundgerüsts sind, werden über die Zahl an Atomen der Nebenbrücken definiert. Die Lokanten der Verknüpfungsstellen dieser Nebenbrücken werden an die Brückenlängen angeschlossen, und zwar hochgestellt und durch Komma

getrennt (der niedrigere zuerst). Die Zahlen, die unabhängige Nebenbrücken anzeigen, werden in der Reihenfolge abnehmender Brückenlänge aufgeführt. Danach folgen abhängige Nebenbrücken^[*] – ebenfalls in der Reihenfolge abnehmender Brückenlänge.^[**]

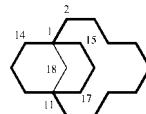
Der Name des polycyclischen Kohlenwasserstoffs wird dann aufgebaut aus:

- einem Präfix, das die Zahl der Ringe anzeigt (Tricyclo, Tetracyclo usw.);
- Zahlen, die die Brückenlängen angeben (mit den entsprechenden hochgestellten Lokanten im Fall von Nebenbrücken), getrennt durch Punkte und in eckige Klammern eingeschlossen (z.B. [4.2.0.0^2.4]);
- dem Namen des Kohlenwasserstoffs, der die Gesamtzahl der Gerüstatome anzeigt.

Beispiele:

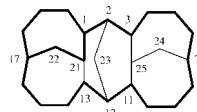


Tricyclo[2.2.1.0^2.6]heptane



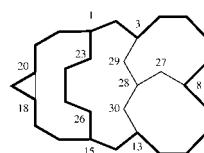
Tricyclo[9.3.3.1^1.11]octadecane

nicht Tricyclo[9.3.3.1]octadecan (bei der unabhängigen Nebenbrücke [C-18] müssen die Lokanten ihrer Brückenköpfe [1,11] angegeben werden)



Hexacyclo[15.3.2.2^3.7.1^2.12.0^13.21.0^11.25]pentacosane

(0^11.25 steht für eine abhängige Nebenbrücke)



Pentacyclo[13.7.4.3^3.8.0^18.20.1^13.28]triacontane

(1^13.28 steht für eine abhängige Nebenbrücke)

Anmerkung: Die Summe der Zahlen für die Atome in den beiden Zweigen des Hautrings, in der Hauptbrücke und in allen Nebenbrücken, plus zwei ist gleich der Gesamtzahl der Gerüstatome – im vorstehenden Beispiel (13 + 7 + 4 + 3 + 1) + 2 = 30; daher der Name Triacontane.

[*] Diese Abweichung von der früheren Regel, nach der alle Nebenbrücken in der Reihenfolge abnehmender Länge angeordnet wurden, wurde wegen der Änderung der Bezifferungsregel in VB-7 erforderlich.

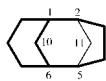
[**] Diese Regel ist unvollständig. Es sind Fälle denkbar, in denen die Brückenköpfe von abhängigen Brücken sich in einer bereits abhängigen Brücke befinden. Dann gilt die Regel nicht mehr. In solchen Fällen müssen gegebenenfalls längere abhängige Nebenbrücken nach kürzeren aufgeführt werden.

Gibt es mehrere mögliche Namen, wendet man die in den Regeln VB-6.1 – VB-6.5 definierten Kriterien der Reihe nach so lange an, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

VB-6.1

Der Hautring soll von der Hauptbrücke so symmetrisch wie möglich geteilt werden.

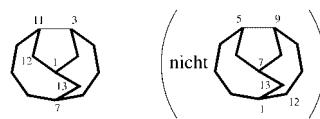
Beispiel:



Tricyclo[4.3.1.1^{2,5}]undecan

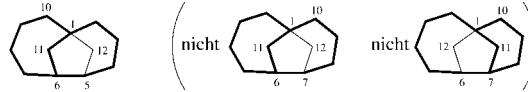
nicht Tricyclo[5.2.1.1^{2,6}]undecan (bei 4.3 ist die Teilung symmetrischer als bei 5.2)

Beispiele:



Tricyclo[5.5.1.0^{3,11}]tridecan

nicht Tricyclo[5.5.1.0^{5,9}]tridecan (3,11 ist niedriger als 5,9)



Tricyclo[4.4.1.1^{1,5}]dodecan

nicht Tricyclo[4.4.1.1^{1,7}]dodecan (1,5 ist niedriger als 1,7)

nicht Tricyclo[5.3.1.1^{1,6}]dodecan (bei 4.4 ist die Teilung des Hautrings symmetrischer als bei 5.3, siehe VB-6.1)



Pentacyclo[4.4.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{8,10}]decan

nicht Pentacyclo[4.4.0.0^{2,8}.0^{3,5}.0^{7,9}]decan (2,3,4,7,8,10 ist niedriger als 2,3,5,7,8,9)

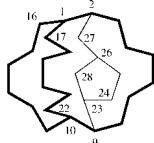
nicht Pentacyclo[4.4.0.0^{2,4}.0^{5,9}.0^{8,10}]decan (2,3,4,7,8,10 ist niedriger als 2,4,5,8,9,10)

nicht Pentacyclo[4.4.0.0^{3,5}.0^{4,10}.0^{7,9}]decan (2,3,4,7,8,10 ist niedriger als 3,4,5,7,9,10)

VB-6.2

Bei Wahlmöglichkeiten zwischen unabhängigen Nebenbrücken soll die zuerst genannte so lang wie möglich sein. Danach soll – falls vorhanden – die als zweite genannte unabhängige Nebenbrücke so lang wie möglich sein usw.

Beispiel:



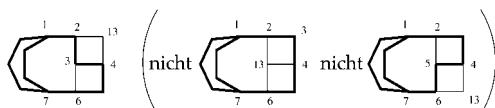
Tetracyclo[8.6.6.5^{2,9}.1^{23,26}]octacosan

nicht Tetracyclo[8.6.6.4^{2,9}.2^{23,25}]octacosan (bei 8.6.6.5.1 ist die erste unabhängige Nebenbrücke länger als bei 8.6.6.4.2)

VB-6.3

Die Zahl der abhängigen Nebenbrücken soll möglichst gering sein.

Beispiel:



Tetracyclo[5.3.2.1^{2,4}.0^{3,6}]tridecan

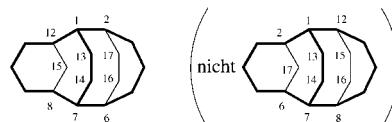
nicht Tetracyclo[5.3.2.1^{2,4}.0^{6,13}]tridecan (0^{6,13} steht für eine abhängige Nebenbrücke)

nicht Tetracyclo[5.3.2.1^{4,6}.0^{2,5}]tridecan (siehe VB-6.4)

VB-6.5

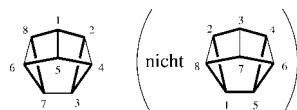
Die hochgestellten Lokanten sollen möglichst niedrig sein, wenn sie in der Reihenfolge der Nennung im Namen verglichen werden.

Beispiele:



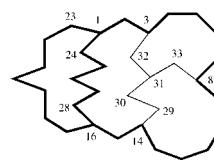
Tetracyclo[5.5.2.2^{2,6}.1^{8,12}]heptadecan

nicht Tetracyclo[5.5.2.2^{8,12}.1^{2,6}]heptadecan (2,6,8,12 ist niedriger als 8,12,2,6)



Pentacyclo[3.3.0.0^{2,4}.0^{3,7}.0^{6,8}]octan

nicht Pentacyclo[3.3.0.0^{2,8}.0^{3,7}.0^{4,6}]octan (2,4,3,7,6,8 ist niedriger als 2,8,3,7,4,6)



Tetracyclo[14.7.5.4^{3,14}.1^{8,31}]tritriacontan

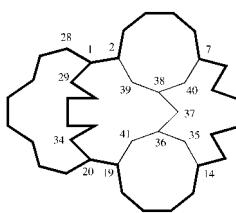
nicht Tetracyclo[14.7.5.4¹⁴.1^{3,31}]tritriacontan (3,14,8,31 ist niedriger als 8,14,3,31)

nicht Tetracyclo[14.7.5.4⁹.1^{14,30}]tritriacontan (3,8,14,31 ist niedriger als 3,9,14,30, siehe VB-6.4)

nicht Tetracyclo[14.7.5.4^{3,14}.1^{9,30}]tritriacontan (3,8,14,31 ist niedriger als 3,9,14,30, siehe VB-6.4)

VB-6.4

Die hochgestellten Lokanten an den Zahlen für die Nebenbrücken sollen so niedrig wie möglich sein, wenn sie in aufsteigender numerischer Reihenfolge (d.h. ohne Berücksichtigung der Reihenfolge ihrer Nennung im Namen) verglichen werden, wobei die Entscheidung an der ersten unterscheidbaren Stelle fällt.

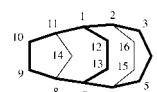
Pentacyclo[18.8.6.5^{2,14,1^{7,38,1^{19,36}}}]hentetracontan

nicht Pentacyclo[18.8.6.5^{2,19,1^{7,38,1^{14,36}}}]hentetracontan (2,14,7,38,19,36 ist niedriger als 2,19,7,38,14,36)

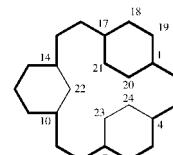
nicht Pentacyclo[18.8.6.5^{7,14,1^{2,38,1^{19,36}}}]hentetracontan (2,14,7,38,19,36 ist niedriger als 7,14,2,38,19,36)

nicht Pentacyclo[18.8.6.5^{7,19,1^{2,38,1^{14,36}}}]hentetracontan (2,14,7,38,19,36 ist niedriger als 7,19,2,38,14,36)

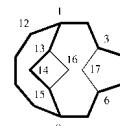
nicht Pentacyclo[18.8.6.3^{2,7,3^{14,19,1^{36,39}}}]hentetracontan (18.8.6.5.1.1 ist größer als 18.8.6.3.3.1, siehe VB-6.2)

Tetracyclo[5.4.2.2^{6,1^{8,11}}]hexadecan

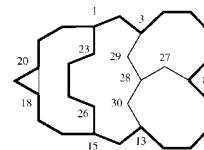
(die zuerst zu beziffernde Nebenbrücke ist an das Brückenkopfatom 11 gebunden)

Tetracyclo[15.2.2.2^{4,7,1^{10,14}}]tetracosan

(die zuerst zu beziffernde Nebenbrücke ist an das Brückenkopfatom 14 gebunden)

Tetracyclo[6.4.3.1^{3,6,1^{13,15}}]heptadecan

(die zuerst zu beziffernde Nebenbrücke ist an das Brückenkopfatom 15 gebunden)

Pentacyclo[13.7.4.3^{3,8,0^{18,20,1^{13,28}}}]triacontan

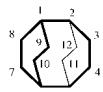
(die unabhängige Brücke wird vor der abhängigen Brücke beziffert)

VB-7: Bezifferung der Nebenbrücken^[*]

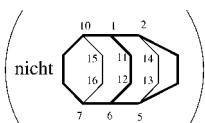
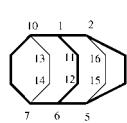
Nach der Bezifferung des Hauptrings und der Hauptbrücke (siehe VB-4) werden alle unabhängigen Nebenbrücken und danach die abhängigen Nebenbrücken beziffert. Die Bezifferung wird vom höchsten Lokanten in Hauptring und Hauptbrücke aus fortgeführt. Alle Nebenbrücken werden der Reihe nach beziffert, beginnend mit der unabhängigen Nebenbrücke, die an das Brückenkopfatom mit der höchsten Nummer gebunden ist. Danach folgt die unabhängige Nebenbrücke, die an das Brückenkopfatom mit der zweithöchsten Nummer gebunden ist, und so weiter. Die Atome einer Nebenbrücke werden ausgehend vom Atom neben dem höhernummerierten Brückenkopf nummeriert.

Anmerkung: Diese Regel basiert auf dem Verfahren, das beim CAS verwendet wird und das dem Verfahren für die Bezifferung anellierter Ringsysteme mit zusätzlichen Brücken (siehe FR-8.6 und FR-8.7^[12]) entspricht. Eine frühere Fassung der Regel (A-32.23^[6]) wurde unterschiedlich interpretiert.^[16]

Beispiele:

Tricyclo[4.2.2.2^{2,5}]dodecan

(die Atome der Nebenbrücke werden ausgehend vom Brückenkopfatom 5 nummeriert)

Tetracyclo[4.4.2.2^{5,2^{7,10}}]hexadecan

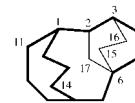
(die zuerst zu beziffernde Nebenbrücke ist an das Brückenkopfatom 10 gebunden)

[*] Die vorherige Fassung ist Regel R-2.4.2.2.^[7]

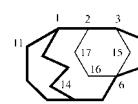
VB-7.1

Bestehen weiterhin mehrere Möglichkeiten, werden niedrigere Nummern für die Atome der Brücke verwendet, die an den höhernummerierten Brückenkopf gebunden ist.

Beispiele:

Tetracyclo[6.3.3.2^{3,6,1^{2,6}}]heptadecan

(die Atome 15 und 16 befinden sich in der Brücke zum Atom 3, nicht zum Atom 2)

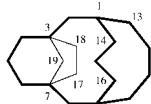
Tetracyclo[6.3.3.2^{2,6,1^{3,6}}]heptadecan

(das Atom 15 befindet sich in der Brücke zum Atom 3, nicht zum Atom 2)

VB-7.2

Bestehen weiterhin mehrere Möglichkeiten, werden längere Brücken vor kürzeren beziffert.

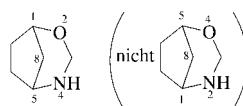
Beispiel:



Tetracyclo[7.4.3.2^{3,7}.1^{3,7}]nonadecan

d.h. niedrigere Lokanten werden zuerst an das ranghöchste Heteroatom, dann an das rangzweithöchste usw. vergeben.

Beispiel:



2-Oxa-4-azabicyclo[3.2.1]octan

nicht 4-Oxa-2-azabicyclo[3.2.1]octan (2-Oxa ist niedriger als 4-Oxa)

VB-8: Benennung modifizierter Ringsysteme (Heteroatome, Unsättigung, Substituenten usw.)

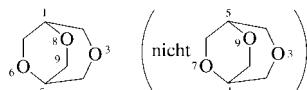
Heteroatome werden durch Austauschpräfixe (siehe B-4.2, B-6.1, R-1.2.2.1, R-9.3) angegeben, Unsättigung in der gewohnten Weise mit den Endungen -en, -dien usw. (siehe A-11.3, R-3.1.1), die Konfiguration mithilfe der R/S-Notation (siehe E-4.9, R-7.2.1) und Substituenten sowie die ranghöchste funktionelle Gruppe ebenfalls in der gewohnten Weise.^[6, 7]

Besteht noch eine Wahlmöglichkeit zwischen Namen oder bei der Nummerierung, wendet man die folgenden Kriterien der Reihe nach an, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

VB-8.1

Den durch Austauschpräfixe beschriebenen Heteroatomen wird ein möglichst niedriger Lokantsatz zugewiesen, wobei diese Lokanten als ein Satz in aufsteigender numerischer Reihenfolge betracht werden.

Beispiele:



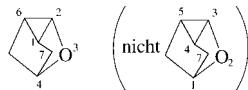
3,6,8-Trioxabicyclo[3.2.2]nonan

nicht 3,7,9-Trioxabicyclo[3.2.2]nonan (3,6,8 ist niedriger als 3,7,9)
Ein besseres Beispiel zur Verdeutlichung dieser Regel:



3-Oxa-1-azabicyclo[2.2.1]heptan

nicht 2-Oxa-4-azabicyclo[2.2.1]heptan (1,3 ist niedriger als 2,4)
dagegen



3-Oxatricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptan

nicht 2-Oxatricyclo[2.2.1.0^{3,5}]heptan (die Lokanten für die Brückenkopfatome der Nebenbrücke bestimmen die Nummerierung; 2,6 ist niedriger als 3,5; siehe VB-6.4)

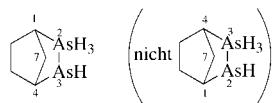
VB-8.1.1

Die Heteroatome erhalten die Lokanten gemäß der Reihenfolge in den Regeln RB-1.4,^[13] R-2.3.3 und R-9.3^[7],

VB-8.1.2

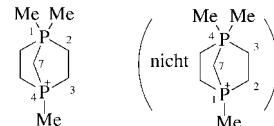
Atomen mit einer durch das Symbol $\lambda^{[8]}$ ausgedrückten von der Standardbindungszahl abweichenden Bindungszahl werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen – wenn notwendig in der Reihenfolge abnehmender Bindungszahl, d.h. ein niedrigerer Lokant für λ^6 vor einem niedrigeren Lokanten für λ^4 .

Beispiele:



2 λ^5 ,3-Diarsabicyclo[2.2.1]heptan

nicht 2,3 λ^5 -Diarsabicyclo[2.2.1]heptan (2 ist niedriger als 3)

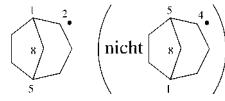


1,1,4-Trimethyl-1 λ^5 ,4-diphosphabicyclo[2.2.1]heptan-4-ium
nicht 1,4,4-Trimethyl-1,4 λ^5 -diphosphabicyclo[2.2.1]heptan-1-ium (1 λ^5 ist niedriger als 4 λ^5)

VB-8.1.3

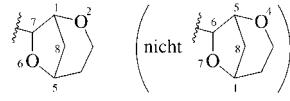
Radikalzentren oder, wenn das Ringsystem ein Substituent ist, seiner Verknüpfungsstelle werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiele:



Bicyclo[3.2.1]octan-2-yl

nicht Bicyclo[3.2.1]octan-4-yl (2 ist niedriger als 4)
dagegen



2,6-Dioxabicyclo[3.2.1]octan-7-yl

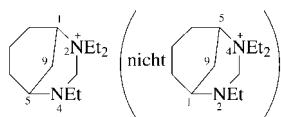
nicht 4,7-Dioxabicyclo[3.2.1]octan-6-yl (2,6 ist niedriger als 4,7; siehe VB-8.1)

Anmerkung: In früheren Ausgaben dieser Regeln (A-31.4 und B-14.1^[6]) wurde octan-yl zu oct-yl zusammengezogen (siehe aber R-2.5 und R-5.8.1^[7] sowie RC-81.1.2,^[9] in denen die Kurzform nicht verwendet wird).

VB-8.1.4

Kationischen Stellen werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiele:

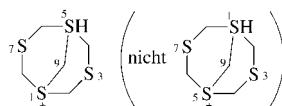


2,2,4-Triethyl-2,4-diazabicyclo[3.3.1]nonan-2-ium

(bevorzugter Name)

alternativer Name: 2,2,4-Triethyl-4-aza-2-azoniabicyclo[3.3.1]nonan

nicht 2,4,4-Triethyl-2,4-diazabicyclo[3.3.1]nonan-4-ium (2-ium ist niedriger als 4-ium)

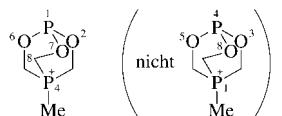


1λ⁴,3,5λ⁴,7-Tetrathiabicyclo[3.3.1]nonan-1-ylum

(bevorzugter Name)

alternativer Name: 3,5λ⁴,7-Trithia-1-thioniabicyclo[3.3.1]nonan

nicht 1λ⁴,3,5λ⁴,7-Tetrathiabicyclo[3.3.1]nonan-5-ylum (1-ylum ist niedriger als 5-ylum)

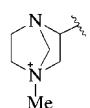


4-Methyl-2,6,7-trioxa-1,4-diphosphabicyclo[2.2.2]octan-4-ium (bevorzugter Name)

alternativer Name: 4-Methyl-2,6,7-trioxa-1-phospho-4-phosphoniabicyclo[2.2.2]octan

nicht 1-Methyl-3,5,8-trioxa-1,4-diphosphabicyclo[2.2.2]octan-1-ium (1,2,4,6,7 ist niedriger als 1,3,4,5,8; siehe VB-8.1)

dagegen



4-Methyl-1,4-diazabicyclo[2.2.1]heptan-4-ium-2-yl

nicht 1-Methyl-1,4-diazabicyclo[2.2.1]heptan-1-ium-3-yl (2 für die Verknüpfungsstelle ist niedriger als 3; siehe VB-8.1.3)

VB-8.2

Den ranghöchsten funktionellen Gruppen werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiele:



Bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2-on

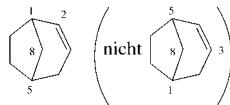
nicht Bicyclo[2.2.1]hept-2-en-5-on (2-on ist niedriger als 5-on)

VB-8.3

Doppelbindungen, deren Atome aufeinanderfolgende Nummern haben, werden möglichst niedrige Lokanten zuge-

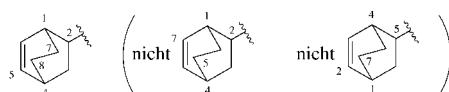
wiesen. Nur der niedrigere der beiden Lokanten einer Doppelbindung wird angegeben, wenn sie sich nur um eins unterscheiden. Wenn die beiden Lokanten nicht aufeinanderfolgend sind, ist ein zusammengesetzter Lokant erforderlich, siehe VB-8.3.1. Bei gleichzeitigem Vorliegen einer Dreifachbindung siehe VB-8.3.3.^[*]

Beispiele:



Bicyclo[3.2.1]oct-2-en

nicht Bicyclo[3.2.1]oct-3-en (2 ist niedriger als 3)
dagegen



Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-yl

nicht Bicyclo[2.2.2]oct-7-en-2-yl (5 ist niedriger als 7)

nicht Bicyclo[2.2.2]oct-2-en-5-yl (2 für die Verknüpfungsstelle ist niedriger als 5, siehe VB-8.1.3)

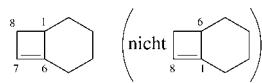
Bei Wahlmöglichkeiten beim Namen oder bei der Nummerierung werden die folgenden Kriterien der Reihe nach angewendet, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

VB-8.3.1

Die Zahl an zusammengesetzten Lokanten, die zur Kennzeichnung von Doppelbindungen benötigt werden, deren Lokanten sich nicht um eins unterscheiden, soll möglichst gering sein. Wenn ein zusammengesetzter Lokant erforderlich ist, wird der höhere Lokant in Klammern aufgeführt. Ein Benzolring (oder Benzenring) wird als das Cyclohexatrien benannt, das der Kekulé-Struktur zum bevorzugten Namen entspricht. Andere aromatische Ringe werden, wenn erforderlich, analog behandelt.

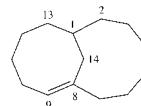
Anmerkung: Diese Regel wurde bereits in der Steroidnomenklatur,^[14] Regel 3S-2.5(2), verwendet, z.B. wurde Estra-5,7,9-trien empfohlen, nicht Estra-5(10),6,8-trien.

Beispiele:



Bicyclo[4.2.0]oct-6-en (auch CAS-Indexname)

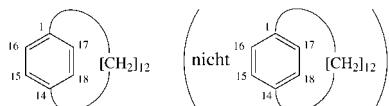
nicht Bicyclo[4.2.0]oct-1(8)-en (einfacher statt zusammengesetzter Lokant)



Bicyclo[6.5.1]tetradec-8-en

nicht Bicyclo[6.5.1]tetradec-1(13)-en (dies ist eine Änderung gegenüber Regel R-3.1.1^[7])

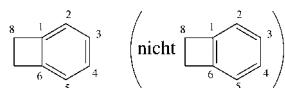
[*] Die Regel VB-8.3.3 hat – wie ihrem Inhalt zu entnehmen ist – Vorrang vor der Regel VB-8.3.



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

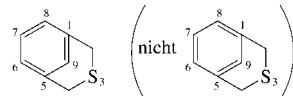
nicht Bicyclo[12.2.2]octadeca-1(17),14(18),15-trien (ein zusammengesetzter Lokant statt zwei)

Anmerkung: Diese Verbindung wurde bei der Erläuterung von Regel A-31.3^[6] als Bicyclo[12.2.2]octadeca-1(16),14,17-trien oder Bicyclo[12.2.2]octadeca-14,16(1),17-trien^[*] benannt. Der zweite Name, der nicht mehr empfohlen wird, entspricht dem CAS-Indexnamen (bicyclo[12.2.2]octadeca-14,16,17-triene). Nach den CAS-Regeln wird ein Ringsystem stets so orientiert, dass der Hauptring im Uhrzeigersinn beziffert wird; daher wird auch der aromatische Ring hier im Uhrzeigersinn beziffert. Ein zusammengesetzter Lokant wird vom CAS nicht verwendet, wenn offensichtlich ist, welches das zweite Atom ist.^[**]



Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-trien (auch CAS-Indexname)

nicht Bicyclo[4.2.0]octa-1(6),2,4-trien (nur einfache Lokanten)



3-Thiabicyclo[3.3.1]nona-1(9),5,7-trien (auch CAS-Indexname)

nicht 3-Thiabicyclo[3.3.1]nona-1(8),5(9),6-trien (ein zusammengesetzter Lokant statt zwei)

dagegen



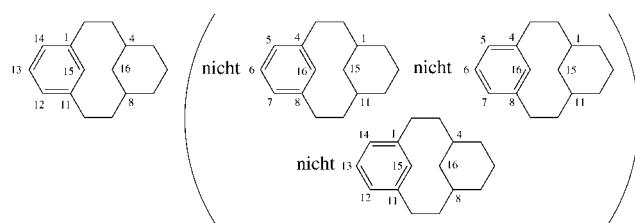
Bicyclo[5.5.1]tridec-1(12)-en-3-yl

nicht Bicyclo[5.5.1]tridec-1-en-11-yl (3 ist niedriger als 11, siehe VB-8.1.3)

VB-8.3.2

Beim Vergleich von Doppelbindungslokanten, unter denen zusammengesetzte Lokanten sind, werden Lokanten in Klammern zunächst ignoriert.

Beispiele:



Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(15),11,13-trien

[*] Der zweite Name wurde bei der Übersetzung der zitierten Regel nicht in die deutsche Ausgabe übernommen.

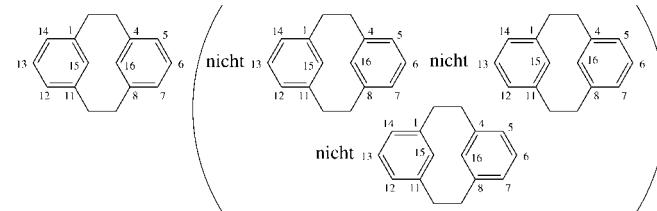
[**] Der mithilfe der Phannomenklatur (*Pure Appl. Chem.* **1998**, *70*, 1513–1545) gebildete Name 1(1,4)-Benzencyclotriodecaphan ist vorzuziehen, da er erstens einfacher ist und zweitens den aromatischen Ring also solchen erkennbar lässt.

nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-4(16),5,7-trien

nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-4,6,8(16)-trien

(1,11,13 ist niedriger als 4,5,7 oder 4,6,8)

nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(14),11(15),12-trien (ein zusammengesetzter Lokant statt zwei, siehe VB-8.3.1)



Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(15),4(16),5,7,11,13-hexaen^[*]

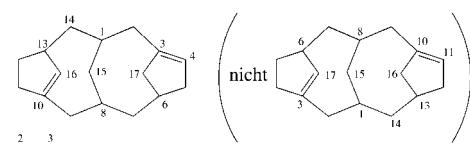
nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(15),4,6,8(16),11,13-hexaen (dieser Name entspricht dem CAS-Indexnamen) (1,4,5,7,11,13 ist niedriger als 1,4,6,8,11,13)

nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(14),4,6,8(16),11(15),12-hexaen (zwei zusammengesetzte Lokanten statt drei, siehe VB-8.3.1)

nicht Tricyclo[9.3.1.1^4,8]hexadeca-1(14),4(16),5,7,11(15),12-hexaen (zwei zusammengesetzte Lokanten statt drei, siehe VB-8.3.1)

Bestehen weiterhin mehrere Möglichkeiten, wird ein möglichst niedriger Lokantensatz unter Berücksichtigung aller Lokanten gewählt.

Beispiel:

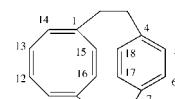


Tetracyclo[6.6.1.1^3,6.1^10,13]heptadeca-3,10(16)-dien

nicht Tetracyclo[6.6.1.1^3,6.1^10,13]heptadeca-3(17),10-dien (3,10,16 ist niedriger als 3,10,17)

Anmerkung: Unter gewissen Umständen (siehe beispielsweise Lit. [15]) wurden in einem anscheinend vollständig konjuguierten Ring lokalisierte Doppelbindungen festgestellt. Die genaue Lage der Doppelbindungen kann durch das vorangestellte Symbol Δ mit dem hochgestellten Lokanten (oder zusammengesetzten Lokanten) für die am niedrigsten nummerierte betreffende Doppelbindung angegeben werden (siehe FR-9.2,^[12] Fußnote zu B-1.2^[6]).

Beispiel:



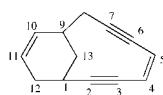
Δ¹¹⁴-Tricyclo[8.4.2.2^4,7]octadeca-1(14),4,6,10,12,15,17-heptaen

VB-8.3.3

Wenn sowohl Doppel- als auch Dreifachbindungen vorhanden sind, wird ein möglichst niedriger Lokantensatz für die Mehrfachbindungen gemeinsam gewählt, danach für die Doppelbindungen.

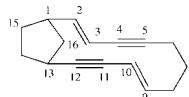
[*] Der Name 1,4(1,3)-Dibenzenacyclohexaphan ist für dieses älteste bekannte Cyclophan vorzuziehen.

Beispiele:



Bicyclo[7.3.1]trideca-4,10-dien-2,6-diin

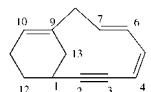
nicht Bicyclo[7.3.1]trideca-5,11-dien-3,7-diin (2,4,6,10 ist niedriger als 3,5,7,11)



Bicyclo[11.2.1]hexadeca-2,9-dien-4,11-diin

nicht Bicyclo[11.2.1]hexadeca-4,11-dien-2,9-diin (jeweils 2,4,9,11, aber 2,9 ist niedriger als 4,11)

dagegen



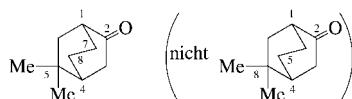
Bicyclo[7.2.1]trideca-4,6,9-trien-2-in

nicht Bicyclo[7.2.1]trideca-1(12),3,5-trien-7-in (kein zusammengesetzter Lokant, siehe VB-8.3.1)

VB-8.4

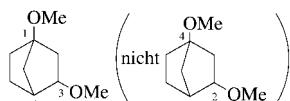
Den mit Präfixen beschriebenen Substituenten werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiele:



5,5-Dimethylbicyclo[2.2.2]octan-2-one

nicht 8,8-Dimethylbicyclo[2.2.2]octan-2-one (5,5 ist niedriger als 8,8)



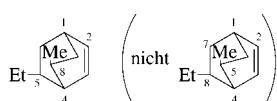
1,3-Dimethoxybicyclo[2.2.1]heptan

nicht 2,4-Dimethoxybicyclo[2.2.1]heptan (1,3 ist niedriger als 2,4)

VB-8.4.1

Den Substituenten werden möglichst niedrige Lokanten in der Reihenfolge der Nennung der Präfixe zugewiesen.

Beispiel:



5-Ethyl-8-methylbicyclo[2.2.2]oct-2-en

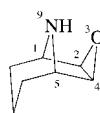
nicht 8-Ethyl-5-methylbicyclo[2.2.2]oct-2-en (5-Ethyl ist niedriger als 8-Ethyl)

VB-8.5

Der Stereodeskriptor *R* wird dem Stereodeskriptor *S* zur Angabe der Konfiguration vorgezogen.^[*]

[*] Das heißt, dass bei Wahlmöglichkeiten einem *R*-konfigurierten Chiralitätszentrum ein niedrigerer Lokant zugewiesen wird.

Beispiele:



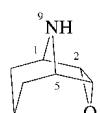
(1*R*,2*R*,4*S*,5*S*)-3-Oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonan^[*]

nicht (1*S*,2*S*,4*R*,5*R*)-3-Oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonan (1*R*, nicht 1*S*)

Beilstein-Name: (1*rN*⁹,2*tH*,4*tH*)-3-oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonane

früherer CAS-Indexname: (1*a*,2*β*,4*β*,5*α*)-3-oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]-nonane

Anmerkung: Diese Verbindung könnte durch eine Extrapolation des Begriffs, der zur Beschreibung von Substituenten an einer bicyclischen Brückenverbindung verwendet wird, auch mit dem Deskriptor *exo* beschrieben werden. Ebenso wäre die folgende mit dem Deskriptor *endo* zu beschreiben. Dieses System wird jedoch nicht empfohlen, da es schwierig auf tetracyclische Systeme und sogar tricyclische Systeme auszudehnen wäre, in denen das bicyclische Bezugssystem für die Deskriptoren *exo* und *endo* schwierig zu ermitteln ist.



(1*R*,2*S*,4*R*,5*S*)-3-Oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonan^[*]

nicht (1*S*,2*R*,4*S*,5*R*)-3-Oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonan (1*R*, nicht 1*S*)

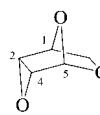
Beilstein-Name: (1*rN*⁹,2*cH*,4*cH*)-3-oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]nonane

früherer CAS-Indexname: (1*a*,2*a*,4*a*,5*α*)-3-oxa-9-azatricyclo[3.3.1.0^2.4]-nonane

VB-9: Angabe der Konfiguration chiraler Systeme

Die Konfiguration eines chiralen Ringsystems, dessen Bezeichnung durch die Struktur festgelegt ist, wird mithilfe des *R/S*-Systems angegeben. Es könnte folglich notwendig sein anzugeben, ob sich ein Name auf ein einzelnes Enantiomer oder ein Racemat bezieht oder ob er die relative Konfiguration eines Enantiomers mit unbekannter absoluter Konfiguration anzeigt.

Beispiel:



(1*S*,2*R*,4*R*,5*S*)-3,6,8-Trioxatricyclo[3.2.1.0^2.4]octan

(auch CAS-Indexname)

früherer CAS-Indexname: [1*S*-(1*a*,2*a*,4*a*,5*α*)]-3,6,8-trioxatricyclo[3.2.1.0^2.4]octane

Anmerkung: Seit Band 129 der *Chemical Abstracts* nutzt CAS ein neues Verfahren zur Angabe der Konfiguration. Dies betrifft auch die Namen in VB-8.5.

Falls es notwendig ist anzugeben, dass der Name für ein Racemat gilt oder dass nur die relative Konfiguration bekannt ist, können die Präfixe *rac* bzw. *rel* verwendet werden. So

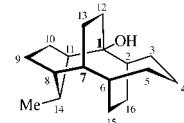
[*] Dem CAS-Indexnamen dieser Verbindung wird zusätzlich das Präfix *rel* vorangestellt.

ergibt sich für das als Beispiel verwendete Trioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan:	[10] „A method for manual generation of correct von Baeyer names of polycyclic hydrocarbons“: D. R. Eckroth, <i>J. Org. Chem.</i> 1967 , <i>32</i> , 3362–3365.
das gezeigte Enantiomer (1S,2R,4R,5S)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[11] „Nomenclature of organic polycycles out of the computer—how to escape the jungle of the secondary bridges“: G. Rücker, C. Rücker, <i>Chimia</i> 1990 , <i>44</i> , 116–120.
dessen Enantiomer (1R,2S,4S,5R)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[12] „Nomenclature of fused and bridged fused ring systems“: <i>Pure Appl. Chem.</i> 1998 , <i>70</i> , 143–216; http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/ .
das Racemat (1RS,2SR,4SR,5RS)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[13] „Revision of the extended Hantzsch-Widman system of nomenclature for heteromonocycles“: <i>Pure Appl. Chem.</i> 1983 , <i>55</i> , 409–416; http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/ .
oder: <i>rac</i> -(1R,2S,4S,5R)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[14] „Nomenclature of Steroids“: <i>Eur. J. Biochem.</i> 1989 , <i>186</i> , 429–458; <i>Pure Appl. Chem.</i> 1989 , <i>61</i> , 1783–1822; http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/ ; <i>Dictionary of Steroids</i> (Hrsg.: R. A. Hill, D. N. Kirk, H. L. J. Makin, G. M. Murphy), Chapman and Hall, London, 1991 , S. XXX–LIX; <i>Biochemical Nomenclature and Related Documents</i> , 2. Aufl. (Hrsg.: IUBMB), Portland Press, London, 1992 , S. 192–221.
relative Konfiguration (1R*,2S*,4S*,5R*)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[15] „Multifaceted Consequences of Holding Two [8]Annulene Rings Face-to-Face. Synthesis, Structural Characteristics, and Reduction Behaviour of [2 ₂](1,5)Cyclooctatetraenophane“: L. A. Paquette, M. A. Kesselmayer, G. E. Underiner, S. D. House, R. D. Rogers, K. Meerholz, J. Heinze, <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 1992 , <i>114</i> , 2644–2652.
oder: <i>rel</i> -(1R,2S,4S,5R)-3,6,8-Tioxatricyclo-[3.2.1.0 ^{2,4}]octan	[16] Im englischen Original der Anmerkung in VB-7 steht noch ein Satz, der übersetzt lautet: Es ist nicht klar, ob sich „abnehmende Reihenfolge“ auf die Länge der Brücken oder auf die Brückenkopflokanten bezieht. Dieser Satz wurde hier weggelassen, da er nicht ganz zutreffend ist. Die Regel A-32.23 besteht im englischen Original aus drei Sätzen, die im Zusammenhang gelesen werden müssen. Danach kann sich die Regel nur auf die Länge der Brücken beziehen, da andernfalls der letzte Satz der Regel überflüssig gewesen wäre. Dies wurde bei der Übertragung der Regel ins Deutsche ^[6] berücksichtigt, sodass der deutsche Regeltext keinen Interpretationsspielraum lässt. Die Formulierung der Regel in der Fassung von 1993 (R-2.4.2.2 ^[7]) ist auch im Englischen wesentlich deutlicher und lässt keine andere Interpretation als die Bezifferung der Nebenbrücken in der Reihenfolge abnehmender Länge zu. (Beim Chemical Abstracts Service wird die Bezifferung der Nebenbrücken seit vielen Jahren – trotz anderslautender Formulierung in Abschnitt ¶155 des <i>Index Guide</i> ^[5] – so vorgenommen, wie es Regel VB-7 jetzt vorsieht.) Durch die mit der Regel VB-7 eingeführte Änderung der Bezifferungsregel ist eine unglückliche Situation eingetreten, da man einem Namen nicht ansehen kann, ob er nach Regel VB-7 oder gemäß R-2.4.2.2 (A-32.23) gebildet wurde. So kann es vorkommen, dass eine Verbindung einen Namen erhält, der zuvor für eine andere Verbindung gültig war. Beispiele:

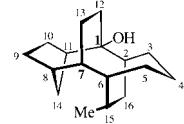
- [1] „Systematik und Nomenklatur bicyclischer Kohlenwasserstoffe“: A. Baeyer, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1900**, *33*, 3771–3775. (Obwohl er seine Forschungsergebnisse immer nur unter Baeyer publizierte, wurde er stets in der ehrenvollen Form als von Baeyer zitiert.)
- [2] „Bornylen und Diazoessigester [Nebst einer Nomenklatur tricyclischer Kohlenstoff-Ringsysteme nach Adolf von Baeyer]“: E. Buchner, W. Weigand, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1913**, *46*, 2108–2117.
- [3] „Proposed international rules for numbering organic ring systems“: A. M. Patterson, *J. Am. Chem. Soc.* **1925**, *47*, 543–561; „The nomenclature of parent ring systems“: A. M. Patterson, *J. Am. Chem. Soc.* **1928**, *50*, 3074–3087.
- [4] A. M. Patterson, L. T. Capell, *The Ring Index*, Reinhold, New York, **1940**; A. M. Patterson, L. T. Capell, D. F. Walker, *The Ring Index*, 2. Aufl., American Chemical Society, Washington, **1960** (Ergänzungen 1963, 1964 und 1965). Dieser wurde fortgeführt als *Parent Compound Handbook* und danach als *Ring Systems Handbook*, Chemical Abstracts Service, Columbus, Ohio, **1993** (kumulierte Supplement: November 1997).
- [5] *Index Guide, Appendix IV*, Chemical Abstracts Service, **1997**.
- [6] *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H, 1979 edition* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Pergamon, Oxford, **1979**; deutsche Ausgabe: *Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie, Bd. 1. Internationale Union für Reine und Angewandte Chemie (IUPAC), Regeln für die Nomenklatur der organischen Chemie* (Hrsg.: Deutscher Zentralausschuss für Chemie), *Abschnitte A und B*, Verlag Chemie, Weinheim, **1975**, *Abschnitt F*, Verlag Chemie, Weinheim, **1978**, und *Abschnitt C*, VCH, Weinheim, **1990**.
- [7] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Organischen Chemie, eine Einführung* (Hrsg.: G. Kruse), VCH, Weinheim, **1997**.
- [8] „Treatment of variable valence in organic nomenclature (Lambda convention)“: *Pure Appl. Chem.* **1984**, *56*, 769–778; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [9] „Revised nomenclature for radicals, ions, radical ions and related species“: *Pure Appl. Chem.* **1993**, *65*, 1357–1455; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.

[*] Der Name wurde gegenüber dem Original ergänzt, um auf die seit 1998 von der hier gegebenen Definition abweichende Verwendung des Präfixes *rel* in den *Chemical Abstracts* hinzuweisen.

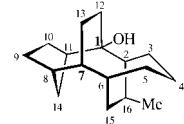
- [10] „A method for manual generation of correct von Baeyer names of polycyclic hydrocarbons“: D. R. Eckroth, *J. Org. Chem.* **1967**, *32*, 3362–3365.
- [11] „Nomenclature of organic polycycles out of the computer—how to escape the jungle of the secondary bridges“: G. Rücker, C. Rücker, *Chimia* **1990**, *44*, 116–120.
- [12] „Nomenclature of fused and bridged fused ring systems“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, *70*, 143–216; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [13] „Revision of the extended Hantzsch-Widman system of nomenclature for heteromonocycles“: *Pure Appl. Chem.* **1983**, *55*, 409–416; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [14] „Nomenclature of Steroids“: *Eur. J. Biochem.* **1989**, *186*, 429–458; *Pure Appl. Chem.* **1989**, *61*, 1783–1822; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>; *Dictionary of Steroids* (Hrsg.: R. A. Hill, D. N. Kirk, H. L. J. Makin, G. M. Murphy), Chapman and Hall, London, **1991**, S. XXX–LIX; *Biochemical Nomenclature and Related Documents*, 2. Aufl. (Hrsg.: IUBMB), Portland Press, London, **1992**, S. 192–221.
- [15] „Multifaceted Consequences of Holding Two [8]Annulene Rings Face-to-Face. Synthesis, Structural Characteristics, and Reduction Behaviour of [2₂](1,5)Cyclooctatetraenophane“: L. A. Paquette, M. A. Kesselmayer, G. E. Underiner, S. D. House, R. D. Rogers, K. Meerholz, J. Heinze, *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 2644–2652.
- [16] Im englischen Original der Anmerkung in VB-7 steht noch ein Satz, der übersetzt lautet: Es ist nicht klar, ob sich „abnehmende Reihenfolge“ auf die Länge der Brücken oder auf die Brückenkopflokanten bezieht. Dieser Satz wurde hier weggelassen, da er nicht ganz zutreffend ist. Die Regel A-32.23 besteht im englischen Original aus drei Sätzen, die im Zusammenhang gelesen werden müssen. Danach kann sich die Regel nur auf die Länge der Brücken beziehen, da andernfalls der letzte Satz der Regel überflüssig gewesen wäre. Dies wurde bei der Übertragung der Regel ins Deutsche^[6] berücksichtigt, sodass der deutsche Regeltext keinen Interpretationsspielraum lässt. Die Formulierung der Regel in der Fassung von 1993 (R-2.4.2.2^[7]) ist auch im Englischen wesentlich deutlicher und lässt keine andere Interpretation als die Bezifferung der Nebenbrücken in der Reihenfolge abnehmender Länge zu. (Beim Chemical Abstracts Service wird die Bezifferung der Nebenbrücken seit vielen Jahren – trotz anderslautender Formulierung in Abschnitt ¶155 des *Index Guide*^[5] – so vorgenommen, wie es Regel VB-7 jetzt vorsieht.) Durch die mit der Regel VB-7 eingeführte Änderung der Bezifferungsregel ist eine unglückliche Situation eingetreten, da man einem Namen nicht ansehen kann, ob er nach Regel VB-7 oder gemäß R-2.4.2.2 (A-32.23) gebildet wurde. So kann es vorkommen, dass eine Verbindung einen Namen erhält, der zuvor für eine andere Verbindung gültig war. Beispiele:



14-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß VB-7
16-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß R-2.4.2.2



15-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß VB-7
14-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß R-2.4.2.2



16-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß VB-7
15-Methyltetracyclo[5.4.2.2^{6,18}.1¹¹]hexadecan-1-ol gemäß R-2.4.2.2