

Lignan-Nomenklatur

Nomenklatur der Lignane und Neolignane**

Obmann: Dietmar Schomburg*, Übersetzer: Ida Schomburg, Köln

LG-0 Einführung

Die Lignane sind eine Gruppe von pflanzlichen Naturstoffen, die sich von der Zimtsäure und ihren Derivaten ableiten und biochemisch zum Phenylalaninstoffwechsel gehören. Sie lassen sich in fünf große Subgruppen einteilen, und ihre derzeitige Nomenklatur ist weder zwischen diesen Gruppen noch innerhalb einer von ihnen konsistent.

Viele Lignane sind physiologisch aktiv, z.B. die tumorhemmenden Podophyllotoxine. Dabei wechselwirken sie auf zwei unterschiedliche Arten mit der Zellteilung bei Tieren und auch beim Menschen. Einige Lignane unterdrücken Funktionen des Zentralnervensystems und inhibieren die cAMP-Phosphodiesterase, während andere als Fischgifte oder Keimungshemmer fungieren. In der traditionellen chinesischen Medizin werden Lignane zur Behandlung von Hepatitis oder als Leberschutz verwendet.

Das wachsende Interesse an den Lignanen und Neolignanen und die zunehmende Zahl modifizierter Strukturen machen es nötig, ein rationelles System für ihre Benennung zu schaffen.

LG-0.1 Frühere Nomenklaturvorschläge

Robinson^[1] erkannte 1927, dass ein gemeinsames Merkmal vieler Naturstoffe ein C_6C_3 -Gerüst ist (d.h. eine Propylbenzol-Grundstruktur) und dass dieses möglicherweise aus Zimtsäure-Einheiten entstanden ist. In einem Übersichtsartikel über Naturharze schlug Haworth^[2] für die Verbindungen, die aus zwei β,β' -verknüpften C_6C_3 -Einheiten bestehen, den Klassennamen Lignan vor (er schrieb zunächst „lignane“, später dann aber „lignan“). Die Benennung der vielfältigen als Lignane klassifizierten Verbindungen basierte hauptsäch-

lich auf Trivialnamen, eine Bezifferung erfolgte, wenn nötig, anhand des systematischen Namens. Dies führte manchmal zu unterschiedlichen Nummerierungssystemen für eng verwandte Verbindungen mit potenzieller Zweideutigkeit bei der Benennung von Analoga. Beispielsweise ergibt sich als Position des Arylsubstituenten in den Arylnaphthalinen vom Typ 2 (2,7'-Cyclolignan, siehe Tabelle 1 und LG-2.1) abhängig von der Position der funktionellen Gruppe C-1 oder C-4.

In einem ausführlichen Übersichtsartikel wurden von Hearon und MacGregor^[3] die unterschiedlichen Gerüsttypen systematisch beziffert, ohne jedoch eine Korrelation zwischen ihnen einzuführen. Freudenberg und Weinges^[4] schlugen 1961 vor, dass die Atome der einen C_6C_3 -Einheit von 1 bis 9 und die der zweiten Einheit von 1' bis 9' nummeriert werden sollten, um ein konsistentes Nummerierungssystem zu schaffen. Damit hatten alle Lignane eine 8-8'-Bindung. Des Weiteren schlugen sie vor, Lignane mit einem zusätzlichen Ring als Cyclolignane zu bezeichnen. Dieses System wurde ausführlicher von Weinges et al. 1978 diskutiert.^[5]

Der Begriff Neolignan wurde von Gottlieb^[6] sowohl für die Lignane als auch für verwandte Verbindungen, bei denen die zwei C_6C_3 -Einheiten durch andere Bindungen verknüpft sind (z.B. 3-3' statt 8-8'), eingeführt. Zusätzlich nahm er Verbindungen in diese Gruppe auf, bei denen ein Sauerstoffatom die beiden C_6C_3 -Einheiten verknüpft. Bei den Arylnaphthalinen ergab sich, dass die zweite Verknüpfung der C_6C_3 -Einheiten zwischen 7 und 2' besteht (nicht zwischen 7 und 6' wie von Freudenberg und Weinges^[4] vorgeschlagen).

Die Einbeziehung der Lignane als eine Form der Neolignane wurde nicht allgemein akzeptiert. Whiting^[7] unterschied die Lignane (d.h. die Derivate mit einer 8-8'-Bindung) von den Neolignanen und unterstrich ihre nicht zufriedenstellende Nomenklatur. Die Unregelmäßigkeiten bei der Angabe

[*] Prof. Dr. D. Schomburg
Institut für Biochemie der Universität Köln
Zülpicher Straße 47, 50674 Köln (Deutschland)
Fax: (+49) 221-470-5092
E-mail: d.schomburg@uni-koeln.de

[**] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Nomenclature of Lignans and Neolignans“ von G. P. Moss (Großbritannien) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2000**, 72, 1493–1523^[17] vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2000. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation. In die Übersetzung wurden von Dr. Karl-Heinz Hellwich, Frankfurt, Änderungen in den Nomenklaturempfehlungen, die sich nach dem Erscheinen des englischen Originaltexts ergeben haben, eingearbeitet. Auf größere Korrekturen gegenüber dem Original wird in Fußnoten hingewiesen.

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 essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die nächste Übersetzung („Nomenklatur der Fullerene $C_{60}I_h$ und $C_{70}D_{5h(6)}$ “) ist für Heft 31/2005 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

der Podophyllotoxin-Konfigurationen wurden von Dewick und Jackson^[8] zusammenfassend beschrieben.

Einige der Unterschiede zwischen den verschiedenen vorgeschlagenen Nomenklatursystemen werden anhand der Gerüste **1–3** dargestellt (Tabelle 1). Dieses Nomenklaturpro-

blem wird zusätzlich durch die Tatsache vergrößert, dass im Chemical-Abstracts(CA)-Index systematische Namen für Lignane und Neolignane verwendet werden. Tabelle 2 veranschaulicht dieses Problem für die Arylnaphthalin-Stammstruktur **2**, bei der die Titelstammverbindung im CA-Index von der Position des ranghöchsten, als Suffix angegebenen Substituenten (falls vorhanden) oder vom ranghöchsten Ringsystem abhängt.

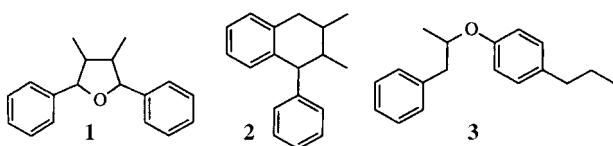


Tabelle 1: Vergleich der Nomenklaturvorschläge für die Gerüste **1–3**.

Gerüst 1	Gerüst 2	Gerüst 3	Lit.
7,7'-Epoxylignan	2,7'-Cyclolignan	8,4'-Oxyneolignan	diese Veröffentlichung
2,5-Diaryltetrahydrofuran	4-Aryl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalin	–	[3]
7,7'-Epoxylignan	Cyclolignan	–	[4]
7.O.7',8.8'-Lignan	8.8',7.2'-Lignan	8.O.4'-Lignan	[6]
2,5-Diaryl-3,4-dimethyltetrahydrofuran	1-Aryltetralin	(8-O-4')-Neolignan	[7]

LG-o.2 Allgemeine Regeln

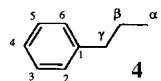
Die folgenden Empfehlungen basieren auf den allgemeinen IUPAC-Empfehlungen zur Benennung von Naturstoffen.^[9,12] Bereits existierende Trivialnamen für Lignane und Neolignane können weiterhin verwendet werden, jedoch wird empfohlen, in Veröffentlichungen die halbsystematischen Namen beim ersten Auftreten einer Substanz ebenfalls zu nennen. Zu beachten ist, dass mehrere Nummerierungssysteme in Gebrauch sind und daher in jedem Fall angegeben werden muss, welches für die Benennung auf der Grundlage eines Trivialnamens verwendet wurde.

Tabelle 2: Variationen im Nummerierungssystem von Arylnaphthalin-Lignanen. Die Ziffern in den Spaltenüberschriften sind die in dieser Empfehlung verwendeten Lokanten (siehe LG-2.1 für das Gerüst **2**), darunter finden sich die Nummerierungen, die im CA-Index für die jeweilige Stammverbindung verwendet werden. Gestrichene Nummern beziehen sich auf die Arylgruppe der Stammverbindung, ein Sternchen bezeichnet eine Carboxygruppe.

Stammverbindung im CA-Index	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1'	2'	3'	4'	5'	6'	7'	8'	9'	Beispiel
5H-benzo[k]bis[1,3]dioxolo-[4,5-b:4',5'-g]xanthen-5-one	5a	14b	14a	3a	4	5	6	7	–	8b	9	9a	12a	13	13a	8a	8	–	Carpanon
1,3-benzodioxole	4a'	8a'	8'	7'	6'	5'	4'	3'	–	5	4	3a	7a	7	6	1'	2'	–	Isogalcatin
furo[3',4':6,7]naphtho[2,3-d]-1,3-dioxol-5,8-dione	4a	9a	10	10a	3a	4	5	5a	6	1'	2'	3'	4'	5'	6'	9	8a	8	Isopicropodophyllon
furo[3',4':6,7]naphtho[2,3-d]-1,3-dioxol-6(8H)-one	4a	9a	10	10a	3a	4	5	5a	6	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	9	8a	8	Justicidin D
furo[3',4':6,7]naphtho[2,3-d]-1,3-dioxol-6(5aH)-one	9a	4a	4	3a	10a	10	9	8a	8	1'	2'	3'	4'	5'	6'	5	5a	6	Podophyllotoxin
furo[3',4':6,7]naphtho[2,3-d]-1,3-dioxol-6(8H)-one	9a	4a	4	3a	10a	10	9	8a	8	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	5	5a	6	Justicidin F
furo[3',4':6,7]naphtho[1,2-d]-1,3-dioxol-7(9H)-one	5a	10a	10b	3a	4	5	6	6a	7	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	10	9a	9	Justicinol
naphthalene	4a	8a	8	7	6	5	4	3	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	1	2	–	Galbulin
2-naphthalenecarboxylic acid	4a	8a	8	7	6	5	4	3	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	1	2	*	Plicatsäure
2-naphthalenecarboxylic acid	8a	4a	5	6	7	8	1	2	*	1'	2'	3'	4'	5'	6'	4	3	–	Thomassäure
2,3-naphthalenedicarboxylic acid	4a	8a	8	7	6	5	4	3	*	1'	2'	3'	4'	5'	6'	1	2	*	Thomasidiosäure
2,3-naphthalenedimethanol	4a	8a	8	7	6	5	4	3	α	1'	2'	3'	4'	5'	6'	1	2	α	Isoolivil
2,3-naphthalenediol	8a	4a	4	3	2	1	8	7	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	5	6	–	Norisoguaicin
2-naphthalenol	4a	8a	1	2	3	4	5	6	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	8	7	–	Guaiacin
2-naphthalenol	4a	8a	1	2	3	4	5	6	–	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	8	7	–	Otobaphenol
naphtho[1,2-d]-1,3-dioxole	5a	9a	9b	3a	4	5	6	7	–	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	9	8	–	Otobain
naphtho[1,2-d]-1,3-dioxole	8a	4a	4	3a	9a	9	8	7	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	5	6	–	Galcatin
naphtho[1,2-d]-1,3-dioxole	9a	5a	5	4	3a	9b	9	8	–	1'	2'	3'	4'	5'	6'	6	7	–	Hypophyllanthin
naphtho[1,2-d]-1,3-dioxol-9-ol	5a	9a	9b	3a	4	5	6	7	–	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	9	8	–	Hydroxytobain
naphtho[1,2-d]-1,3-dioxol-6(7H)-one	5a	9a	9b	3a	4	5	6	7	–	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	9	8	–	Otobanon
naphtho[2,3-c]furan-1(3H)-one	4a	8a	8	7	6	5	4	3a	3	1'	2'	3'	4'	5'	6'	9	9a	1	Sikkimotoxin
naphtho[2,3-c]furan-1(3H)-one	4a	8a	8	7	6	5	4	3a	3	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	9	9a	1	Collinusin
naphtho[2,3-c]furan-1(3H)-one	8a	4a	5	6	7	8	9	9a	1	1'	2'	3'	4'	5'	6'	4	3a	3	Conidendrin
naphtho[2,3-c]furan-1(3H)-one	8a	4a	5	6	7	8	9	9a	1	5'	4'	3a'	7a'	7'	6'	4	3a	3	Justicidin C
phenol	8a'	4a'	4'	3a'	9a'	9	8'	7'	–	4	3	2	1	6	5	5'	6'	–	Attenuol

LG-1 Grundstammstrukturen

Die Lignane und Neolignane sind eine Klasse von Naturstoffen, die durch Kupplung von zwei C_6C_3 -Einheiten **4** gebildet werden. Der Begriff Lignan wurde von Haworth^[2]



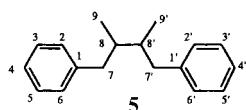
für diejenigen Strukturen eingeführt, bei denen die Einheiten β,β' -verknüpft sind. Bei anderen Verknüpfungen (m,m' ; γ,γ' ; β,β' usw.) werden die Verbindungen Neolignane genannt. Zu ihnen zählen auch solche, bei denen die beiden Einheiten durch ein Sauerstoffatom verknüpft sind, das für Nomenklaturzwecke als verbrückend betrachtet wird.

Anmerkungen:

1. Im Englischen wird zwischen den Schreibweisen lignan und lignane unterschieden. Die Klassennamen Lignan und Neolignan werden gewöhnlich ohne ein „e“ am Ende geschrieben. Die Namen der nachfolgend aufgeführten Stammstrukturen werden im Englischen mit einem Schluss-„e“ geschrieben, wenn sie gesättigte Seitenketten enthalten (zur Behandlung ungesättigter Seitenketten siehe LG-3.1).
2. Zum Zwecke der Bezifferung der unterschiedlichen Stammstrukturen sind die Atome der C_6C_3 -Einheit **4** von 1 bis 9 nummeriert, wobei die α -Position 9, die β -Position 8 und die γ -Position 7 entspricht.

LG-1.1 Lignan

Wenn die zwei C_6C_3 -Einheiten **4** durch eine β,β' -Bindung verknüpft sind, wird die Stammstruktur Lignan (engl.: lignane) (**5**) als Grundlage für die Benennung verwendet.

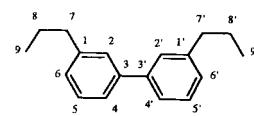


LG-1.2 Neolignan

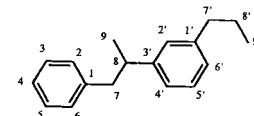
Wenn die zwei C_6C_3 -Einheiten **4** durch eine andere als eine β,β' -Bindung verknüpft sind, wird die Stammstruktur Neolignan (engl.: neolignane) als Grundlage für die Benennung verwendet. Die Lokanten der Verknüpfungsstellen der beiden Einheiten werden dem Namen vorangestellt, und der zweite Lokant erhält einen Strich. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- a) Position 8
- b) niedrigere ungestrichene Nummer
- c) niedrigere gestrichene Nummer

Beispiele:



3,3'-Neolignan
nicht 5,5'-Neolignan,
3 ist niedriger als 5

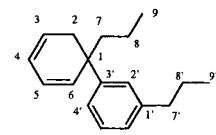


8,3'-Neolignan
nicht 3,8'-Neolignan,
8 ist 8' vorzuziehen

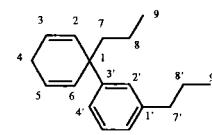
LG-1.3 Indizierter Wasserstoff

Wenn die beiden C_6C_3 -Einheiten **4** eines Neolignans unter Beteiligung der Position 1 (oder 1') verknüpft sind, kann der zugehörige C_6 -Ring nicht aromatisch sein. Vielmehr können noch maximal zwei nichtkumulierte Doppelbindungen vorhanden sein, weshalb es eine Position geben muss (außer C-1 bzw. C-1'), die im Stammkohlenwasserstoff gesättigt ist. Diese Position wird durch den Lokanten für diese Position und ein großes kursives (oder unterstrichenes) H angezeigt, das für indizierten Wasserstoff steht (siehe Regeln A-21.6^[10] und R-1.3^[13]). Gibt es eine Wahlmöglichkeit, wird der niedrigste Lokant gewählt.

Beispiele:



2H-1,3'-Neolignan
nicht 6H-1,3'-Neolignan,
2 ist niedriger als 6



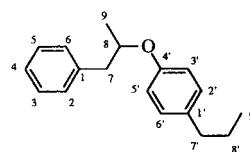
4H-1,3'-Neolignan

LG-1.4 Oxyneolignan

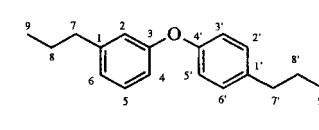
Sind die zwei C_6C_3 -Einheiten **4** nur durch ein Sauerstoffatom verknüpft, wird der Name Oxyneolignan für die Stammstruktur verwendet. Die Lokanten der beiden Positionen, die durch das Sauerstoffatom verknüpft sind, werden dem Namen vorangestellt, der zweite Lokant erhält einen Strich. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- a) Position 8
- b) niedrigere ungestrichene Nummer
- c) niedrigere gestrichene Nummer

Beispiele:



8,4'-Oxyneolignan
nicht 4,8'-Oxyneolignan,
8 ist 8' vorzuziehen



3,4'-Oxyneolignan
nicht 5,4'- oder 4,3'-
oder 4,5'-Oxyneolignan

LG-1.5 Bezifferung der Lignan-, Neolignan- und Oxyneolignangerüste

Bei den Formeln der Stammstrukturen in LG-1.1–1.4 ist auch die korrekte Nummerierung angegeben. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei der Nummerierung, gilt folgende Rangfolge:

- möglichst niedrigere Lokanten für Modifizierungen der Stammstruktur
- möglichst niedrige Lokanten für indizierten Wasserstoff
- möglichst niedrige Lokanten für die ranghöchste funktionelle Gruppe, die als Suffix dem Namen angefügt wird (LG-4)
- möglichst niedrige Lokanten für Doppelbindungen in der Seitenkette (LG-3)
- möglichst niedrige Lokanten (als Satz betrachtet) für Substituenten, die als Präfixe genannt werden (siehe z. B. Balanophonin in LG-5.4; die Methoxygruppe ist an Position 3, nicht 5).
- möglichst niedrige Lokanten (in der Reihenfolge ihrer Nennung) für Substituenten, die als Präfixe genannt werden (siehe z. B. die zweite Verbindung in LG-5.4; die Methoxygruppe ist an Position 3, nicht 5).

Diese Kriterien folgen den etablierten Verfahren der systematischen Nomenklatur.^[10,13]

LG-2 Modifizierungen der Grundstammstruktur

Modifizierungen der Grundstammstruktur (LG-1) durch zusätzliche Ringe und/oder das Hinzufügen/Entfernen von Kohlenstoffatomen (die nicht als Substituenten behandelt werden) werden durch die nachfolgend beschriebenen Präfixe angezeigt; diese werden immer direkt vor dem Namen der Grundstammstruktur aufgeführt, nicht zusammen mit den Präfixen für Substituenten (LG-4). Sie sind also nicht vom Namen abtrennbar.

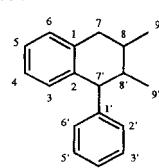
LG-2.1 Zusätzliche Kohlenstoffringe (das Präfix Cyclo-)

a) Cycloignane

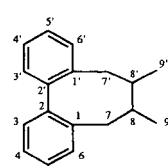
Wenn das Kohlenstoffgerüst eines Lignans einen zusätzlichen Ring aufweist, der durch eine direkte Bindung zwischen zwei Atomen des Lignangerüsts entstanden ist, wird dies mit dem Präfix Cyclo- unter Angabe der Lokanten der Verknüpfungsstellen angezeigt (siehe Regeln F-4.1,^[9] RF-4.3^[12] und R-1.2.6.1^[13]). Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- möglichst niedrige ungestrichene Nummer
- möglichst niedrige gestrichene Nummer

Beispiele:



2,7'-Cyclolignan
nicht 2',7-, 6,7'- oder 6',7'-Cyclolignan



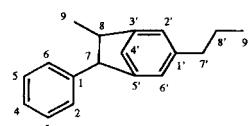
2,2'-Cyclolignan
nicht 6,6'-Cyclolignan

b) Cycloneolignane

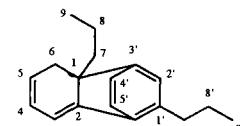
Wenn das Kohlenstoffgerüst eines Neolignans einen zusätzlichen Ring aufweist, der durch eine direkte Bindung zwischen zwei Atomen des Neolignangerüsts entstanden ist, wird dies mit dem Präfix Cyclo- unter Angabe der Lokanten der Verknüpfungsstellen angezeigt (siehe Regeln F-4.1,^[9] RF-4.3^[12] und R-1.2.6.1^[13]). Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- möglichst niedrige ungestrichene Nummer für Cyclo
- möglichst niedrige gestrichene Nummer für Cyclo
- möglichst niedriger Lokant für indizierten Wasserstoff

Beispiele:



5',7-Cyclo-8,3'-neolignan
nicht 3,8'-Cyclo-5,7'-neolignan
nicht 3',7-Cyclo-8,5'-neolignan
8,3'-Neolignan ist die bevorzugte
Stammstruktur



6H-2,6'-Cyclo-1,3'-neolignan
nicht 6H-2,2'-Cyclo-1,5'-neolignan
1,3'-Neolignan ist die bevorzugte
Stammstruktur

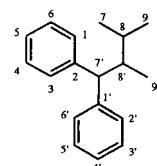
Anmerkung: Die als Grundlage für die Benennung dienenden Stammverbindungen gibt es nicht, aber sie werden zur Benennung von hydrierten oder teilhydrierten Verbindungen benötigt (siehe beispielsweise die 13. Verbindung in LG-5.3^[*]; vgl. auch die 2. Verbindung in LG-4.4).

LG-2.2 Ringsspaltung (das Präfix Seco-)

Die Spaltung einer Ringbindung unter Hinzufügung der erforderlichen Wasserstoffatome wird durch das Präfix Seco- und die Lokanten der gespaltenen Bindung beschrieben (siehe Regeln F-4.1,^[9] RF-4.4.1^[12] und R-1.2.6.2^[13]). Die ursprüngliche Bezifferung des Systems wird beibehalten. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- möglichst niedrige ungestrichene Nummer
- möglichst niedrige gestrichene Nummer

Beispiel:



1,7-Seco-2,7'-cyclolignan

Anmerkung: Die strikte Anwendung der Regeln ergibt hier den Namen 1,7-Seco-1,7'-cyclolignan, was eine andere Bezifferung des Rings C1–C6 zur Folge hat. Die wahrscheinliche Verwandtschaft mit 2,7'-Cyclolignan wird jedoch am

[*] Dieser Verweis wurde gegenüber der englischen Ausgabe eingefügt.

besten durch den empfohlenen Namen angezeigt. Ein anderer möglicher Name wäre 1(7→7')abeo-Lignan (LG-2.7).^[*]

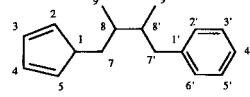
LG-2.3 Entfernung von Gerüstatomen (das Präfix Nor-)

Lässt sich eine Stammstruktur von Lignan, Neolignan oder Oxyneolignan durch das Entfernen eines oder mehrerer Kohlenstoffatome ableiten, wird dies durch das Präfix Nor-, Dinor- usw. (siehe Regeln F-4.2, F-4.4^[9] und RF-4.1.1^[12]) ausgedrückt. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei der Position des entfernten Kohlenstoffatoms, gilt folgende Rangfolge:

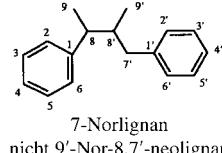
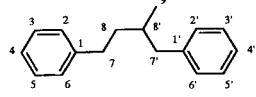
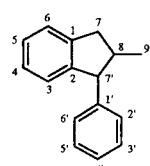
- ungestrichene Nummer
- höhere Nummer

Diese Nummer wird beim Präfix Nor- angegeben, wobei die Nummern aller anderen Atome unverändert bleiben. Falls nötig wird die Lage von Doppelbindungen durch indizierten Wasserstoff angegeben.

Beispiele:^[**]



2,7'-Cyclo-8',9'-dinor-8,7'-neolignan
nicht 2',7-Cyclo-8,9-dinor-7,8'-neolignan
(8,7' ist 7,8' vorzuziehen)



In beiden Fällen ist Lignan die bevorzugte Stammstruktur.

Anmerkung: Im zweiten Beispiel sind die beiden modifizierenden Präfixe in alphabetischer Reihenfolge aufgeführt (siehe Regeln F-4.13^[9][[**]] und RF-4.7^[12]).

[*] Das Präfix *abeo*- wurde ursprünglich^[9–11,13,16] kursiv gesetzt. Aus Gründen der Einheitlichkeit bei den stammsystemmodifizierenden Präfixen wurde in der revidierten Fassung von Abschnitt F (Nomenklatur der Naturstoffe)^[12] empfohlen, dieses Präfix nicht kursiv zu setzen. Dies hat zur Folge, dass es bei der alphabetischen Einordnung berücksichtigt wird, ihm ein Bindestrich vorausgeht, und es am Anfang eines Namens groß geschrieben wird, hier also 1(7→7')-Abeolignan. Die Änderung wurde in die Lignannomenklatur nicht übernommen. Die Verwendung des Präfixes *abeo*- ist zugelassen, aber nicht obligatorisch. Sie eignet sich am besten, um Reaktionsmechanismen oder die Biogenese zu veranschaulichen. Im Allgemeinen sind jedoch systematische Namen oder Namen unter Verwendung der Präfixe *Homo*- und *Nor*- vorzuziehen.

[**] Die Reihenfolge der Präfixe Cyclo- und Nor- bei der zweiten Verbindung wurde der in späteren Beispielen angepasst und ist damit in Einklang mit der Anmerkung.

[**] Dieser Verweis wurde gegenüber der englischen Ausgabe korrigiert.

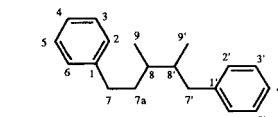
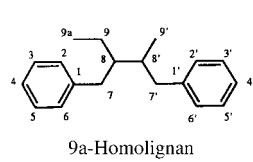
LG-2.4 Erweiterung des Gerüsts (das Präfix *Homo*-)

Leitet sich die Stammstruktur von Lignan, Neolignan oder Oxyneolignan durch Einfügung eines oder mehrerer Kohlenstoffatome ab, wird dies durch das Präfix *Homo*-, *Dihomo* usw. ausgedrückt (siehe Regeln F-4.5^[9] und RF-4.2^[12]). Die Nummer für das zusätzliche Kohlenstoffatom besteht aus dem Lokanten des Atoms, nach dem es eingefügt wurde, und einem „a“ (analog bei mehreren hinzugefügten Atomen: „b“, „c“ usw.). Gibt es eine Wahlmöglichkeit, gilt folgende Rangfolge:

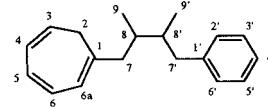
- ungestrichene Nummer
- höhere Nummer

Falls nötig wird die Lage von Doppelbindungen durch indizierten Wasserstoff angegeben (LG-1.3).

Beispiele:



nicht 9a'-Homo-8,9'-neolignan
(Lignan ist die bevorzugte Stammstruktur)



nicht 2'H-6a'-Homolignan (6a ist 6a' vorzuziehen)

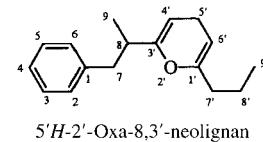
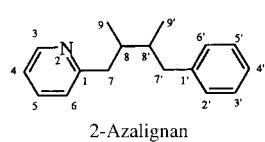
LG-2.5 Ersatz von Gerüstatomen (die Präfixe *Oxa*- usw.)

Wird ein Kohlenstoffatom von Lignan, Neolignan oder Oxyneolignan durch ein Heteroatom ersetzt, wird die Austauschnomenklatur („oxa-aza“) verwendet (siehe Regeln B-4,^[10] F-4.11,^[9] RF-5,^[12] R-1.2.2.1 und R-2.3.3.2^{[13][*]}). Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- ungestrichene Nummer
- niedrigere Nummer

Falls nötig wird die Lage von Doppelbindungen durch indizierten Wasserstoff angegeben (LG-1.3).

Beispiele:



[*] Dieser Verweis wurde gegenüber der englischen Ausgabe korrigiert.

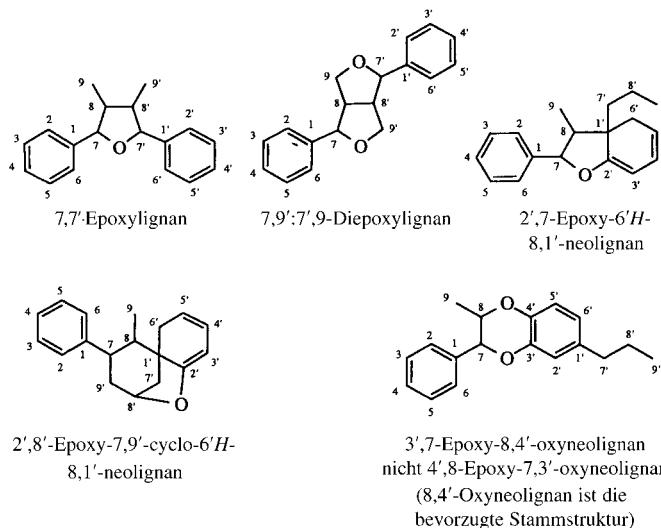
LG-2.6 Verbrückte Stammstrukturen (die Präfixe Epoxy- usw.)

Zusätzliche Ringe, die durch das Verknüpfen von zwei Positionen eines Lignans, Neolignans oder Oxyneolignans durch ein Atom oder eine geeignete Gruppe gebildet werden, werden durch den Namen des verbrückenden Atoms oder der verbrückenden Gruppe als Präfix mit Angabe der zugehörigen Lokanten gekennzeichnet. Die bekanntesten Verbindungen mit derartigen zusätzlichen Ringen sind die Furanoid- und die Furanofuranoidlignane. In diesen Fällen ist das verbrückende Atom Sauerstoff, und das Präfix lautet Epoxy-. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- a) ungestrichene Nummer
- b) niedrigere Nummer

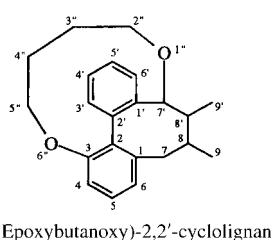
Gibt es mehrere identische Brücken, werden die Lokanten paarweise genannt, jeweils getrennt durch einen Doppelpunkt. Falls nötig wird die Lage von Doppelbindungen durch indizierten Wasserstoff angegeben (LG-1.3).

Beispiele:



Zusammengesetzte Brücken werden als Kombination aus einfachen Brücken benannt und in runde Klammern gesetzt. Ist die Brücke zusätzlich substituiert, wird sie – beginnend am Brückenkopfatom mit der höchsten Nummer – mit doppelt gestrichenen Nummern versehen ($1''$), um sie von den ungestrichenen und einfach gestrichenen Nummern der Atome des Hauptgerüsts zu unterscheiden.

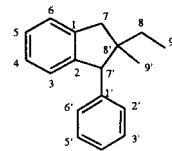
Beispiel:



LG-2.7 Bindungswanderung (das Präfix abeo-)^[**]

Eine Stammstruktur, die keines der konventionellen Gerüste enthält, die aber formal als aus einem solchen durch die Wanderung von einer oder mehreren Bindungen entstanden betrachtet werden kann, kann durch das Präfix $x(y \rightarrow z)abeo-$ (siehe Regeln F-4.9,^[9] RF-4.5.1^[12] und R-1.2.7.1^[13]) bezeichnet werden. Dieses beschreibt die Wanderung der mit dem Atom x endenden Gruppe von der Position y zur Position z .

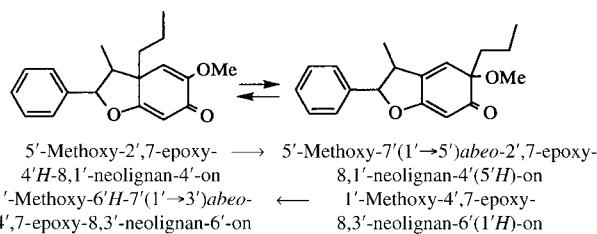
Beispiel:



$7(8 \rightarrow 8')abeo-2,7'-Cyclolignan$

Alternative Namen für diese Verbindung sind: $7(8 \rightarrow 8')abeo-2,7'-Cyclolignan$, $8(7 \rightarrow 8)abeo-2,7'-Cyclo-8,7'-neolignan$ und $8'(7 \rightarrow 8)abeo-2,7'-Cyclo-8,7'-neolignan$. Bei den letzten beiden Namen liegt die Betonung auf der Verwandtschaft zu den entsprechenden nichtumgelagerten Neolignanen. Ein systematischer Name ist 8 -Ethyl- $2,7$ -cyclo- $8',9'$ -dinor- $8,7'$ -neolignan (vgl. zweite Verbindung in LG-2.3). Das Präfix $abeo-$ kann auch zur Verdeutlichung der Beziehung zwischen zwei Lignanen, Neolignanen oder Oxyneolignanen genutzt werden.

Beispiel:



Anmerkung: Die Lage der Doppelbindungen wird in der linken Struktur durch indizierten Wasserstoff angezeigt (LG-1.3), in der rechten durch addierten Wasserstoff (LG-4.4).^[**] Der Grund hierfür sind die unterschiedlichen hypothetischen Stammverbindungen.

LG-2.8 Kombination von Präfixen^[**]

Sind mehrere modifizierende Präfixe erforderlich, werden ihre Wirkungen auf die Stammstruktur sequenziell von rechts nach links „rückwärtsgehend“ (siehe Regel RF-4.7^{[12][***]})

[*] Siehe Fußnote zu LG-2.2.

[**] Alternativ können die gesättigten Positionen – einschließlich der der Carbonylgruppe – durch nicht abtrennbare Hydropräfixe angegeben werden.

[***] Dieser Verweis wurde gegenüber der englischen Ausgabe korrigiert.

gelesen. Gibt es eine Wahlmöglichkeit zwischen verschiedenen Operationen, sollte die geringste Zahl an Veränderungen gewählt werden. Die Präfixe sollten soweit wie möglich in alphabetischer Reihenfolge von links nach rechts verwendet werden. Es müssen jedoch die falsche Verwendung von Präfixen und das Auftreten chemisch unmöglichlicher Situationen vermieden werden. So heißt die in LG-2.2 als Beispiel verwendete Verbindung 1,7-Seco-2,7'-cyclolignan und nicht 2,7'-Cyclo-1,7-secolignan, denn ein 1,7-Secolignan kann nicht existieren.

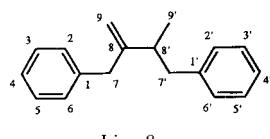
LG-3 Änderungen im Hydrierungsgrad

Die Stammstrukturen in LG-1 und LG-2 haben die maximale Zahl an nichtkumulierten Doppelbindungen in den Ringen C-1 bis C-6 und C-1' bis C-6' sowie gesättigte Seitenketten. Die Verfahren zur Beschreibung von Änderungen an diesem Oxidationsgrad hängen vom Ort der Modifizierung ab.

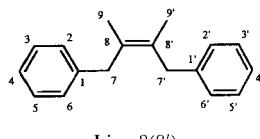
LG-3.1 Ungesättigte Seitenketten

Eine Doppel- oder Dreifachbindung in der Seitenkette (C-7 bis C-9 und C-7' bis C-9') des Lignan-, Neolignan- oder Epoxyneolignangerüsts wird durch Ersatz der Endung -an durch -en bzw. -in und die entsprechenden Lokanten für die Lage der Mehrfachbindung angezeigt. Wenn zwei Doppelbindungen vorhanden sind, wird die Endung -an durch -dien ersetzt, wobei das Schluss-„a“ des Stammes erhalten bleibt.

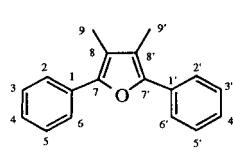
Beispiele:



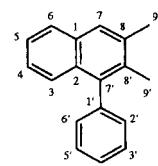
Lign-8-en



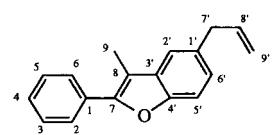
Lign-8(8')-en



7,7'-Epoxyligna-7,7'-dien



2,7'-Cycloligna-7,7'-dien

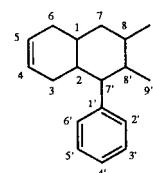


4',7-Epoxy-8,3'-neoligna-7,8'-dien

LG-3.2 Reduktion eines aromatischen Rings

Wird ein aromatischer Ring reduziert, wird die Position der zusätzlichen Wasserstoffatome durch das Präfix Dihydro- (Tetrahydro- usw.) mit den entsprechenden Lokanten angegeben. Zur Behandlung der durch das Vorhandensein eines Ketons ausgelösten Sättigung sei auf LG-4 verwiesen.

Beispiel:

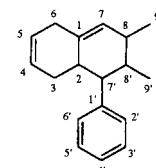


1,2,3,6-Tetrahydro-2,7'-cyclolignan

LG-3.3 Doppelbindung zwischen aromatischem Ring und Seitenkette

Die Verschiebung einer Doppelbindung aus einem aromatischen Ring zum angrenzenden Atom der Seitenkette wird als Reduktion des aromatischen Rings (Präfix Dihydro-; siehe LG-3.2) und Oxidation der Seitenkette (vorangestelltes Präfix Didehydro-) unter Angabe der entsprechenden Lokanten beschrieben.

Beispiel:



1,7-Didehydro-1,2,3,6-tetrahydro-2,7'-cyclolignan

LG-4 Lignan-, Neolignan- und Oxyneolignanderivate

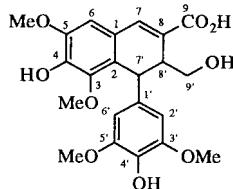
Funktionelle Gruppen und andere Substituenten werden entsprechend den allgemeinen Regeln der Nomenklatur organischer Verbindungen benannt. Falls möglich wird die ranghöchste funktionelle Gruppe als Suffix und alle anderen Gruppen als Präfix zitiert. Für die häufigsten Gruppen ist die Rangfolge für die Benennung mit einem Suffix: Carbonsäure, Lacton, Ester, Keton, Alkohol. Die als Präfixe genannten Gruppen werden in alphabetischer Reihenfolge aufgeführt, wobei multiplikative Präfixe wie Di-, Tri- und Tetra- nicht berücksichtigt werden. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei der Angabe der Position einer funktionellen Gruppe, gilt folgende Rangfolge:

- ungestrichene Nummer
- möglichst niedrige Lokanten für die ranghöchste funktionelle Gruppe
- möglichst niedrige Lokanten (als Satz betrachtet) für Substituenten, die als Präfixe genannt werden
- möglichst niedrige Lokanten (in der Reihenfolge ihrer Nennung) für Substituenten, die als Präfixe genannt werden.

LG-4.1 Carbonsäuren

Wird eine Methylgruppe eines Lignans oder Neolignans in eine Carboxygruppe umgewandelt, wird dies durch das Suffix -säure und den Lokanten für diese Position angezeigt.

Beispiel:

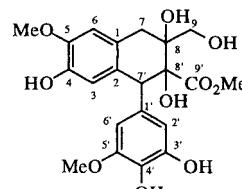


4,4',9'-Trihydroxy-3,3',5,5'-tetramethoxy-
2,7'-cyclolign-7-en-9-säure

LG-4.3 Ester

Die Veresterung einer Carbonsäure (LG-4.1) wird angegeben, indem das Suffix -säure in -oat umgewandelt wird und der Name der Alkylgruppe (oder Arylgruppe)^[*] an den Anfang des Namens gestellt wird.

Beispiel:

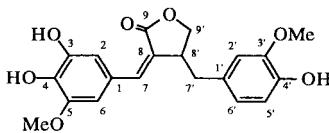


Methyl-3',4,4',8,8',9-hexahydroxy-5,5'-dimethoxy-
2,7'-cyclolignan-9'-oat

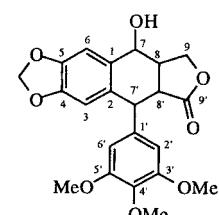
LG-4.2 Lactone

Lactone werden bezeichnet, indem man die Endung -säure der entsprechenden Säure in -olacton ändert. Der Lokant der Säuregruppe und danach der der Hydroxygruppe, die das Lacton bilden, werden in diese Endung nach dem ersten o eingefügt. Die Vorgabe, dass die Carbonylgruppe eine ungestrichene Nummer erhält, steht zwar im Gegensatz zur gängigen Praxis bei symmetrischen Gerüsten (z. B. Steganon (LG-5.3) und Enterolacton (LG-5.5)). Die Verwendung ungestrichener Nummern hilft jedoch beim Vergleich von verwandten Verbindungen wie anderen Carbonsäurederivaten und der Konfiguration (LG-5.3). Wenn die Lactongruppe Teil einer Brücke ist (z. B. Gomisin D in LG-5.3), wird das eine Sauerstoffatom als Teil der Brücke und das zweite als „Keton“ betrachtet (LG-4.4).

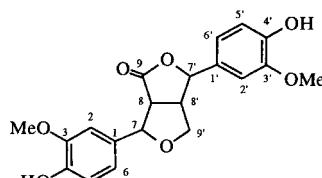
Beispiele:



3,4,4'-Trihydroxy-3',5-dimethoxylign-
7-eno-9,9'-lacton



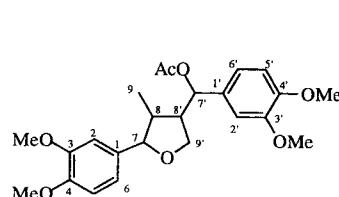
7-Hydroxy-3',4',5'-trimethoxy-
4,5-methylendioxy-2,7'-
cyclolignano-9',9'-lacton



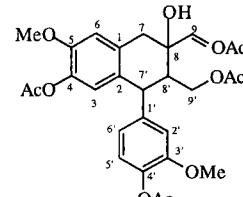
4,4'-Dihydroxy-3,3'-dimethoxy-
7,9'-epoxylignano-9,7'-lacton

Die Veresterung einer alkoholischen oder phenolischen Hydroxygruppe (LG-4.5) wird durch Anfügen des Suffixes -yl (-diyl, -triyl usw.) an Lignan, Neolignan oder Oxyneolignan unter Angabe des Lokanten für die entsprechende Position und danach der anionischen Form der Acyloxygruppe angezeigt. Gibt es eine ranghöhere Gruppe, z. B. eine Carbonsäure, ein Lacton oder eine veresterte Carbonsäure, wird für die veresterte Hydroxygruppe das Acyloxy-Präfix verwendet.

Beispiele:



(3,3',4,4'-Tetramethoxy-
7,9'-epoxylignan-7'-yl)acetat



(8-Hydroxy-3',5-dimethoxy-2,7'-
cyclolignan-4,4',9,9'-tetrayl)tetraacetat

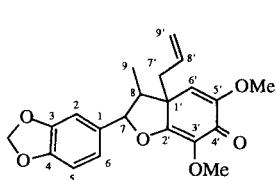
LG-4.4 Ketone

Ketone werden mit dem Suffix -on bezeichnet (oder dem Präfix Oxo-, wenn eine ranghöhere Gruppe mit Suffix benannt ist). Wenn das Keton als Suffix einem der Ringatome von C-2 bis C-6 zugeordnet ist und es notwendig ist, die Position der Doppelbindungen anzugeben, dann geschieht dies mithilfe von addiertem Wasserstoff, der in Klammern hinter dem Lokanten für die Ketogruppe angegeben wird.^[**]

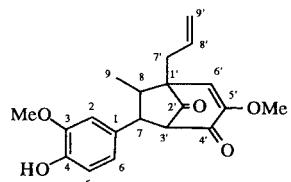
[*] Ergänzung gegenüber der englischen Ausgabe.

[**] Alternativ können die gesättigten Positionen – einschließlich der der Carbonylgruppe – durch nicht abtrennbare Hydropräfixe angegeben werden.

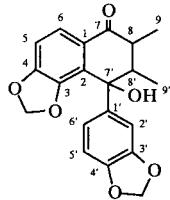
Beispiele:[*]



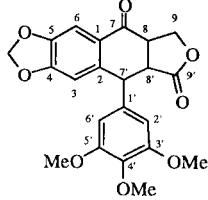
3',5'-Dimethoxy-3,4-methylendioxy-2',7-epoxy-4'H-8,1'-neolign-8'-en-4'-on



4-Hydroxy-3,5'-dimethoxy-2'H-3',7-cyclo-8,1'-neolign-8'-en-2',4'(3'H)-dion oder 4-Hydroxy-3,5'-dimethoxy-3',4'-dihydro-2'H-3',7-cyclo-8,1'-neolign-8'-en-2',4'-dion



7'-Hydroxy-3,4:3',4'-bis(methylendioxy)-2,7'-cyclolignan-7-on

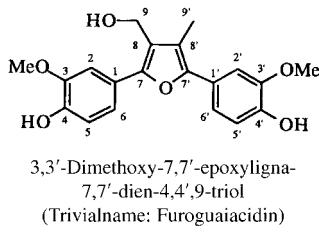


3',4',5'-Trimethoxy-4,5-methylendioxy-7-oxo-2,7'-cyclolignano-9',9-lacton

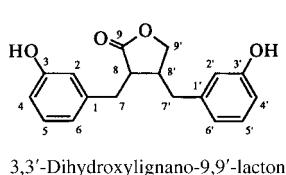
LG-4.5 Alkohole und Phenole

Alkohole und Phenole werden mit dem Suffix -ol oder – wenn es eine ranghöhere Gruppe gibt – dem Präfix Hydroxy- benannt.

Beispiele:



3,3'-Dimethoxy-7,7'-epoxylign-7,7'-dien-4,4',9-triol
(Trivialname: Furoguaiacidin)

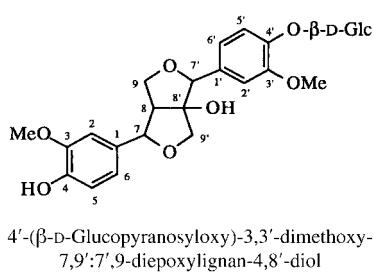


3,3'-Dihydroxylignano-9,9'-lacton

LG-4.6 Ether sowie Alkohol- und Phenolderivate

Ether können nur mit einem Alkoxy-Präfix benannt werden. Zuckerderivate erhalten ein Glycosyloxy-Präfix. Ester alkoholischer oder phenolischer Lignane, Neolignane oder Oxyneolignane wurden in LG-4.3 behandelt.

Beispiel:



4'-(β -D-Glucopyranosyloxy)-3,3'-dimethoxy-7,9':7,9-diepoxylignan-4,8'-diol

[*] Bei der zweiten Verbindung wurde im ersten Namen der indizierte Wasserstoff gegenüber der englischen Ausgabe gemäß LG-1.3 und der Regel c in LG-7 ergänzt und der zweite Name gegenüber der englischen Ausgabe hinzugefügt.

LG-5 Stereochemie

Die meisten natürlichen Lignane und Neolignane sind optisch aktiv. Um die absolute oder relative Konfiguration anzugeben und um verwandte Strukturen vergleichen zu können, ist es vorteilhaft, eine Standardorientierung der Strukturformel zu nutzen.

LG-5.1 Orientierung der Strukturformel

Für die Orientierung werden folgende Kriterien angewendet:

- ungestrichene Nummern auf die linke Seite
- die ungestrichenen Nummern 1–6 in die untere linke Ecke
- die einfach gestrichenen Nummern 1'–6' in die untere rechte Ecke
- dem Chiralitätszentrum mit der niedrigsten Nummer wird die α -Konfiguration zugewiesen.

Abweichend hiervon besteht die Übereinkunft, das 2,7'-Cyclolignangerüst mit dem Tetrahydronaphthalinring horizontal und der Phenylgruppe nach unten zu zeichnen und das 2,2'-Cyclolignangerüst mit den beiden Benzolringen übereinander.

LG-5.2 Symbole für die Konfiguration (Stereodeskriptoren)

Die Konfiguration von Atomen, die Teil eines die Position 8 einschließenden Ringsystems sind, wird mit α beschrieben, wenn sich ein Brückenkopf-Wasserstoffatom (oder -Substituent) oder ein am Ringsystem gebundener Substituent unterhalb der Ebene befindet, und mit β , wenn es/er sich oberhalb befindet (siehe Regel RF-10.1^[12]). Bei zwei Substituenten an einem Atom gilt folgende Rangfolge:

- der Substituent, der ein Gerüstatom enthält
- die nach den Sequenzregeln bevorzugte Gruppe (siehe Anhang zu Abschnitt E in Lit. [14] und Lit. [15]).

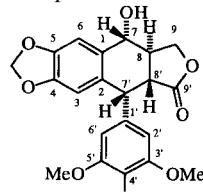
Wenn α und β nicht angewendet werden können, sollten R und S verwendet werden (siehe Regeln R-7.2.1^[13] und E-4.9^[14]). Bei überbrückten Bicylen wird der größte Ring als Ebene definiert, und die Orientierung der kürzesten Brücke wird mit α und β beschrieben. Bei zwei gleich langen Brücken wird empfohlen, jede Brückenkopfkonfiguration mit R und S zu beschreiben. Auch die Konfiguration von Chiralitätszentren, die durch Substituenten an einer Brücke entstehen, sollte mit den Stereodeskriptoren R und S angegeben werden. In den seltenen Fällen, in denen Doppelbindungskonfiguration relevant ist, sollten diese durch die Stereodeskriptoren E und Z (siehe Regeln R-7.1.2^[13] und E-2.2^[14]) beschrieben werden. Jede Gruppe von Stereodeskriptoren wird in Klammern vor den Namen gestellt.^[*] Bei unbekannter Konfiguration wird der Stereodeskriptor ξ verwendet.

[*] Diese Regel entspricht der früheren Handhabung, wie sie auch in Lit. [16] zu finden ist. In der Praxis und in neueren IUPAC-Empfehlungen, z.B. in der revidierten Fassung von Abschnitt F (Nomenklatur der Naturstoffe),^[12] werden heute jedoch häufig unterschiedliche Arten von Stereodeskriptoren für verschiedene stereogene Einheiten (innerhalb einer Struktureinheit) in einem Klammernsatz zusammengefasst. Dieser neueren Entwicklung sollte – zumindest für die Stereodeskriptoren R , S , E und Z – auch in der Lignannomenklatur gefolgt werden. Allerdings wurden die Namen in den folgenden Beispielen nicht den neuen Gepflogenheiten angepasst (z.B. hieße der Stereodeskriptor der dritten Verbindung sonst $(7\alpha,7'R,8\alpha,8'\alpha)$).

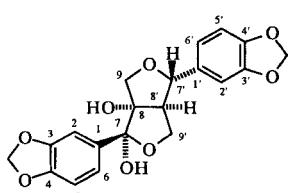
LG-5.3 Absolute Konfiguration

Wenn nicht anders angegeben (LG-5.4), wird davon ausgegangen, dass die Konfigurationssymbole die absolute Konfiguration beschreiben (LG-5.2).

Beispiele:^[*]

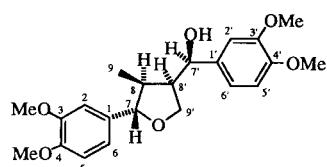


(7 α ,7' α ,8 α ,8' β)-7-Hydroxy-3',4',5'-trimethoxy-4,5-methylendioxy-2,7'-cyclolignan-9',9'-lacton
(Trivialname: Podophyllotoxin)

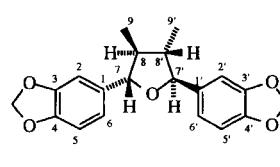


(7 β ,7' α ,8 α ,8' α)-3,4,3',4'-Bis(methylendioxy)-7,9',7'-diepoxylignan-7,8-diol
(Trivialname: Arboreol)

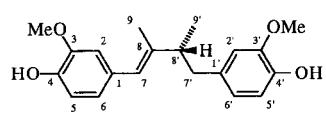
Anmerkungen: Die 5. und die 6. Verbindung sind aufgrund der Prioritätsregeln^[14,15] beide 7E-konfiguriert. Bei der 7. Verbindung bezieht sich 2R_a auf die axial-chirale Biphenyleinheit (siehe Lit. [15] für Details). Da die Atome 7', 8 und 8' bei der 15. Verbindung nicht Teil eines Ringsystems sind, werden die Stereodeskriptoren R/S und nicht α/β



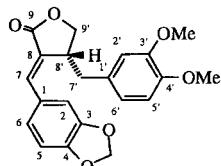
(7 R)-7,9',7'-triamethoxy-7,9'-epoxylignan-7'-ol
(Trivialname: Magnostellin A)



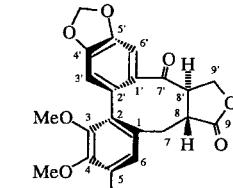
(7 α ,7' β ,8 β ,8' α)-3,4,3',4'-Bis(methylendioxy)-7,7'-epoxylignan
(Trivialname: (-)-Galbacin)



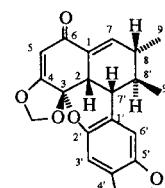
(7E)-(8' R)-3,3'-Dimethoxylignan-7-en-4,4'-diol
(das Z-Isomer dieser Verbindung hat den Trivialnamen (-)-Guaiacolsäure)



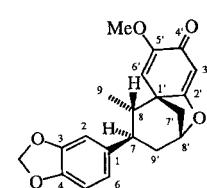
(7E)-(8' α)-3',4'-Dimethoxy-3,4-(methylendioxy)lignan-7-eno-9',9'-lacton



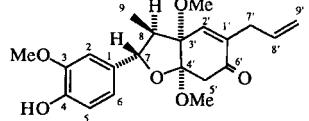
(2 R_a)-(8 β ,8' α)-3,4,5-(Trimethoxy-4',5'-methylendioxy-7'-oxo-2,2'-cyclo-lignano-9,9'-lacton
(Trivialname: (-)-Steganon)



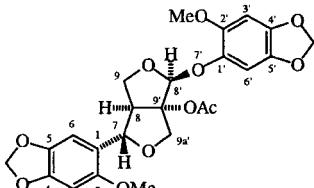
(3 R)-(2 β ,7' β ,8 α ,8' β)-3,4,4',5'-Bis(methylendioxy)-1,7-didehydro-1,2,3,6-tetrahydro-2',3-epoxy-2,7'-cyclo-lignan-6-on
(Trivialname: Carpanon)



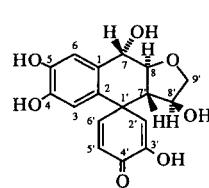
(1' β ,7 β ,8 α ,8' β)-5'-Methoxy-3,4-methylendioxy-2',8'-epoxy-7,9'-cyclo-4'H-8,1'-neolignan-4'-on
(Trivialname: Futoenon)



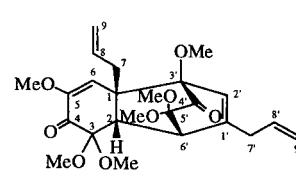
(3' α ,4' α ,7 α ,8 β)-4-Hydroxy-3,3',4'-trimethoxy-4',5'-dihydro-4'-7-epoxy-8,3'-neolignan-8'-en-6'(3'H)-on
oder (3' α ,4' α ,7 α ,8 β)-4-Hydroxy-3,3',4'-trimethoxy-3',4',5',6'-tetrahydro-4',7-epoxy-8,3'-neolignan-8'-en-6'-on
(Trivialname: Liliflone)



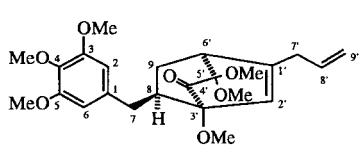
[(7 α ,8 α ,8' β ,9' α)-2,2'-Dimethoxy-4,5,4',5'-bis(methylendioxy)-7,9 a' ,8',9'-diepoxy-7'-oxa-9 a' -homo-8,9'-neolignan-9'-yl]acetat
(Trivialname: Phrymarolin I)



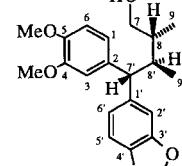
(1' β ,7 α ,7' β ,8 α ,8' β)-3',4,5,7,8'-Pentahydroxy-8,9'-epoxy-1',2-cyclo-9-nor-8,7'-neolignan-4'-on
(Trivialname: Hydroxyathrotaxin)



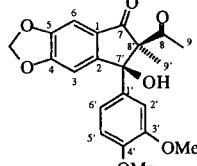
(3' R ,6' S)-(1 β ,2 β)-3,3,3',5,5',5'-Hexamethoxy-2,3,5',6'-tetrahydro-2,6'-cyclo-1,3'-neoligna-8,8'-dien-4,4'(3'H)-dion
(Trivialname: Asaton)



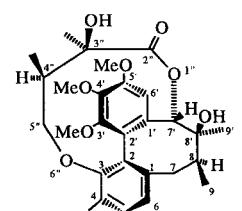
(3' S ,6' S ,8 R)-3,3',4,5,5',5'-Hexamethoxy-5',6'-dihydro-6',9-cyclo-8,3'-neolignan-8'-en-4'(3'H)-on
(Trivialname: Heterotropanone)



(7' S ,8 R ,8' S)-4,5-Dimethoxy-3',4'-methylendioxy-1,7-seco-2,7'-cyclolignan-7-ol



(8' R)-(7 α)-7'-Hydroxy-3',4'-dimethoxy-4,5-methylenedioxy-7(8'→8')abeo-2,7'-cyclolignan-7,8-dion



(2 S_a ,3' R ,4' R)-(7 α ,8 β ,8' α)-3',8'-Dihydroxy-3',4',5'-trimethoxy-3',4'-dimethyl-4,5-methylenedioxy-3,7'-epoxybutanoxo-2,2'-cyclolignan-2'-on
(Trivialname: Gomisin D)

[*] Die im Namen der 6. Verbindung gegenüber der englischen Ausgabe eingefügten Klammern um methylendioxy machen den Namen klarer. Da es sich um einen Substituenten aus mehreren Komponenten handelt, sollte dieses Präfix generell, also auch wenn ein Bindestrich nachfolgt, in Klammern eingeschlossen werden. Bei Carpanon wurde der Name gegenüber der englischen Ausgabe

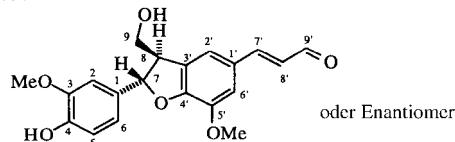
korrigiert. Die Namen von Liliflone, Asaton und Heterotropanone wurden gegenüber der englischen Ausgabe gemäß Regel R-0.1.8.5^[13] korrigiert und bei Liliflone wurde ein alternativer Name in Einklang mit der Fußnote zu LG-4.4 eingefügt. Bei der 16. Verbindung sei auf die Fußnote zu LG-2.2 verwiesen.

verwendet. Siehe auch die *Anmerkung* in LG-2.2. Beim Namen für Gomisin D ist zu beachten, dass, obwohl die ranghöchste funktionelle Gruppe eine Lacton ist, das Sauerstoffatom der Carbonylgruppe als Keton behandelt wird, weil das andere Sauerstoffatom in die Brücke integriert ist.

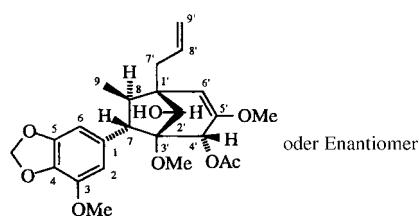
LG-5.4 Relative Konfiguration

Ist die relative, nicht aber die absolute Konfiguration bekannt, wird dies durch das kursiv gesetzte Präfix *rel*- (siehe Regeln E-4.10(b)^[14] und RF-10.6^[12]) für eines der Enantiomere dargestellt. Falls bekannt, kann die Drehrichtung des polarisierten Lichts mit (+) oder (-) hinzugefügt werden. Wenn die Stereodeskriptoren *R/S* für die Beschreibung der absoluten Konfiguration eines Teils einer Verbindung benötigt werden, müssen **alle** Chiralitätszentren, von denen nur die relative Konfiguration bekannt ist, ^[*] mit den Stereodeskriptoren *R^{*}/S^{*}* gekennzeichnet sein (siehe Regeln E-4.10,^[14] R-7.2.2,^[13] F-6.7^[9] und RF-10.6^[12]).

Beispiele:^[**]



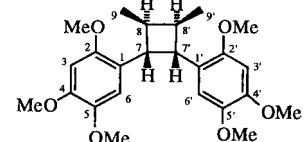
rel-(7'*E*)-(7*α*,8*β*)-4,9-Dihydroxy-3,5'-dimethoxy-4',7-epoxy-8,3'-neolign-7'-en-9'-al
(Trivialname: Balanophonin)



rel-[(2*R*)-(1*β*,3*β*,4*α*,7*α*,8*β*)-2'-Hydroxy-3,3',5'-trimethoxy-4,5-methylendioxy-3',4'-dihydro-2'H-3',7-cyclo-8,1'-neolign-8'-en-4'-yl]acetat

Die relative Konfiguration eines achiralen Lignans, Neolignans oder Oxyneolignans wird durch die in LG-5.2 genannten Stereodeskriptoren in der gleichen Weise wie in LG-5.3 beschrieben spezifiziert.

Beispiel:



(7*α*,7*′α*,8*β*,8*′β*)-2,2',4,4',5,5'-Hexamethoxy-7,7'-cyclo lignan
(Trivialname: Heterotropan)

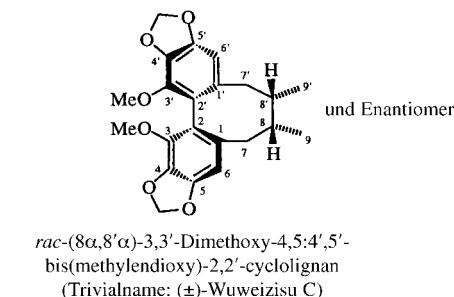
[*] Der Text wurde aus Gründen der Verständlichkeit gemäß Regel E-4.10(c)^[14] gegenüber der englischen Ausgabe ergänzt. Diese Regel besagt, dass das Präfix *rel*- nicht verwendet werden kann, wenn von einem Teil einer Verbindung die absolute Konfiguration bekannt ist. Dies gilt natürlich auch, wenn diese mit den Stereodeskriptoren *α* und *β* beschrieben wird.

[**] Der Name der zweiten Verbindung wurde gegenüber der englischen Ausgabe gemäß Regel R-0.1.8.5^[13] korrigiert.

LG-5.5 Racemate

Racemate werden benannt, indem das kursiv gestellte Präfix *rac*- dem Gesamtnamen des Enantiomers vorangestellt wird, in dem das Chiralitätszentrum mit der niedrigsten Nummer *α*-konfiguriert ist (siehe Regeln F-6.6^[9] und RF-10.5^[12]).

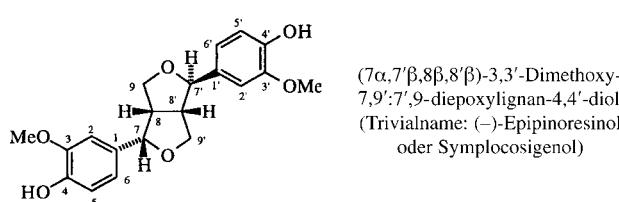
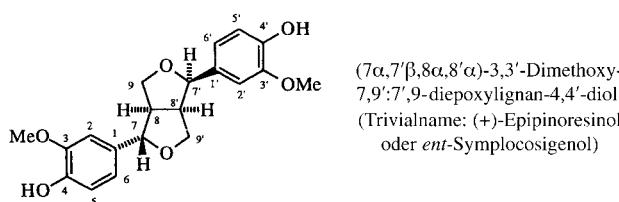
Beispiele:



LG-5.6 Enantiomere

Die Konfiguration von Enantiomeren lässt sich im Allgemeinen eindeutig mit den in LG-5.3 vorgestellten Regeln angeben. Will man beschreiben, dass zwei Lignane oder Neolignane Enantiomere sind, obwohl nur die relative Konfiguration, oder nicht einmal diese bekannt ist, kann das kursiv gestellte Präfix *ent*- genutzt werden (siehe Regeln F-6.5^[9] und RF-10.3^[12]). Häufiger dient dieses Präfix jedoch zur Beschreibung von Beziehungen unter Verwendung von Trivialnamen.

Beispiele:



LG-6 Trimere der C_6C_3 -Einheit und höhere Analoga

Die höheren Analoga der Lignane und Neolignane, die aus drei und mehr C_6C_3 -Einheiten bestehen, werden in Analogie zu den Terpenoiden als Sesquineolignane, Dineolignane usw. bezeichnet. Sie können analog zu den Lignanen und Neolignanen benannt werden. Eine der terminalen Einheiten erhält die ungestrichenen Nummern, die anderen der Reihe nach die einfach, doppelt usw. gestrichenen. Gibt es eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, gilt folgende Rangfolge:

- a) niedriger gestrichene Nummer
- b) Position 8
- c) niedrigere Nummer

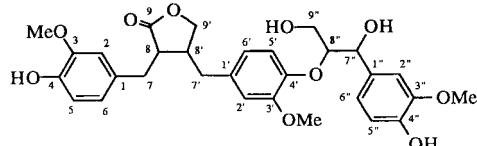
Eine Oxybindung (LG-1.4) wird getrennt von und vor den direkten C-C-Bindungen angegeben. Bis-, Tris- usw. wird beim Vorliegen mehrerer Oxybindungen verwendet. Die Zahl der C_6C_3 -Einheiten wird durch das entsprechende Präfix und den Namen Neolignan angezeigt:

- drei C_6C_3 -Einheiten: Sesquineolignan
- vier C_6C_3 -Einheiten: Dineolignan
- fünf C_6C_3 -Einheiten: Sesterneolignan

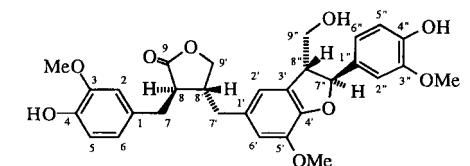
LG-6.1 Sesquineolignane

Derivate des Sesquineolignangerüsts werden entsprechend den Empfehlungen in LG-2 bis LG-5 benannt. Bei Wahlmöglichkeiten gelten dieselben Kriterien, wobei die Bevorzugung von ungestrichenen Nummern gegenüber einfach gestrichenen um die von einfach gestrichenen Nummern gegenüber zweifach gestrichenen erweitert wird.

Beispiele:



4,4'',7'',9''-Tetrahydroxy-3,3',3''-trimethoxy-4',8''-oxy-8,8''-sesquineolignano-9,9'-lacton
(Trivialname: Lappaol E)

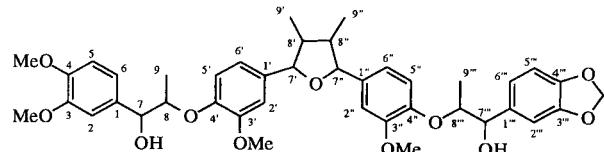


(7''β,8β,8'α,8''α)-4,4'',9''-Trihydroxy-3,3',5'-trimethoxy-4',7''-epoxy-8,8',8''-sesquineolignano-9,9'-lacton
(Trivialname: Lappaol A)

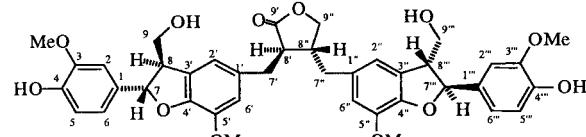
LG-6.2 Dineolignane

Dineolignane werden analog zu den Sesquineolignanen benannt. Die Lokanten der zusätzlichen C_6C_3 -Einheit sind dreifach gestrichen.

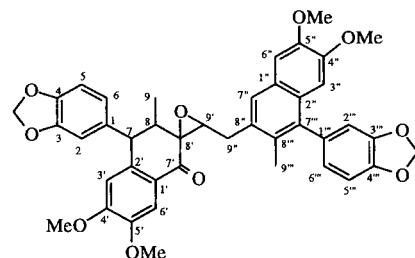
Beispiele:



7,7'''-Dihydroxy-3,3',4-tetramethoxy-3'',4'',4'''-methylendioxy-7'',7'''-epoxy-8,4':4'',8'''-bisoxo-8',8'''-dineolignan
(Trivialname: Manassantin B)



(7α,7'''β,8β,8'β,8''α,8''α)-4,4'',9,9'''-Tetrahydroxy-3,3'',5',5'''-tetramethoxy-4',7:4'',7'''-diepoxy-8,3':8'8''3'',8'''-dineolignano-9',9'''-lacton
(Trivialname: Lappaol F)



4',4'',5',5'''-Tetramethoxy-3,4:3'',4''-bis(methylendioxy)-8',9'-epoxy-2',7:2'',7'''-dicyclo-8,8':9',9'':8'',8'''-dineolignano-7'',7'''-dien-7'-on

LG-7 Zusammenfassung

Um einen halbsystematischen Namen für ein Lignan, Neolignan, Oxyneolignan oder ein höheres Homologes zu erstellen, sollte schrittweise in folgender Reihenfolge vorgegangen werden:

- a) Identifizierung der C_6C_3 -Einheiten
- b) Identifizierung der bevorzugten Verknüpfung zwischen den Einheiten, wobei eine β,β' -Verknüpfung (LG-1.1) vor anderen Kohlenstoff-Kohlenstoff-Verknüpfungen bevorzugt ist. Sauerstoff-verknüpfte Einheiten sind am geringwertigsten (LG-1.4). Homologe werden analog behandelt (LG-6).
- c) Identifizierung der jeweiligen Stammverbindung, einschließlich indiziertem Wasserstoff (LG-1.3) falls notwendig
- d) Identifizierung zusätzlicher Ringe (LG-2.1), geöffneter Ringe (LG-2.2), entfernter Gerüstatome (LG-2.3), zusätzlicher Gerüstatome (LG-2.4), ersetzter Gerüstatome (LG-2.5), von Brücken wie Epoxy (LG-2.6) sowie von umgelagerten Gerüstabschnitten (LG-2.7). In allen Fällen muss indizierter Wasserstoff, falls erforderlich, angegeben werden.
- e) Identifizierung von Doppelbindungen in den Seitenketten
- f) Identifizierung der ranghöchsten funktionellen Gruppe, falls vorhanden, die als Suffix angegeben wird (LG-4.1 bis

- LG-4.5), und Angabe von addiertem Wasserstoff, falls erforderlich
- g) Identifizierung weiterer Änderungen im Hydrierungsgrad, z.B. eine Reduktion des aromatischen Rings (LG-3.2) oder eine Doppelbindung zwischen einem aromatischen Ring und der Seitenkette (LG-3.3)^[*]
- h) Identifizierung anderer funktioneller Gruppen (abgesehen von der ranghöchsten funktionellen Gruppe, die als Suffix verwendet wird) und Substituenten,^[**] die mit Präfixen benannt werden (LG-4.3 bis LG-4.6)
- i) Ausrichtung der Strukturformel gemäß den Regeln in LG-5.1
- j) Identifizierung der vorhandenen stereogenen Einheiten (LG-5.3 bis LG-5.6) und der passenden Stereodeskriptoren (LG-5.2)
- k) Bezifferung der Gerüststruktur durch Anwendung der beschriebenen Auswahlregeln in der angegebenen Reihenfolge, bis ein konsistentes Nummerierungssystem erhalten wird (siehe auch LG-1.5)
- l) Konstruktion des Namens in der Reihenfolge Stereodeskriptoren (Punkt j), abtrennbare Präfixe in alphabetischer Reihenfolge, dabei die multiplikativen Präfixe ignorierend (Punkt h), Hydropräfixe (Punkt g),^[***] nicht abtrennbare Präfixe in der Reihenfolge *abeo*- bis *cyclo*- (d.h. umgekehrt zur identifizierten Reihenfolge; Punkt d), Stammstruktur (Punkt c), Doppelbindungen in den Seitenketten (Punkt e) und ranghöchste funktionelle Gruppe (Punkt f). Indizierter oder addierter Wasserstoff wird, wo nötig, eingefügt.

- [1] R. Robinson, *Proc. Univ. Durham Philos. Soc.* **1927–1928**, 8, 14–59.
- [2] R. D. Haworth, *Annu. Rep. Prog. Chem.* **1936**, 33, 266.
- [3] W. M. Hearon, W. S. MacGregor, *Chem. Rev.* **1955**, 55, 957–1068.
- [4] K. Freudenberg, K. Weinges, *Tetrahedron* **1961**, 115.
- [5] K. Weinges, F. Nader, F. K. Kunstler in *Chemistry of Lignans* (Hrsg.: C. B. S. Rao), Andhra University Press, Indien, **1978**, S. 1–37.
- [6] O. R. Gottlieb, *Fortschr. Chem. Org. Naturst.* **1978**, 35, 1–72.
- [7] D. A. Whiting, *Nat. Prod. Rep.* **1985**, 2, 191–211; D. A. Whiting, *Nat. Prod. Rep.* **1987**, 4, 499–525; D. A. Whiting, **1990**, 7, 349–364.
- [8] P. M. Dewick, D. E. Jackson, *Phytochemistry* **1981**, 20, 2277–2280.
- [9] „Nomenclature of Organic Chemistry, Section F: Natural Products and Related Compounds (Provisional Recommendations 1976)“: *Eur. J. Biochem.* **1978**, 86, 1–8; auch S. 491–511 in Lit. [10] und S. 19–26 in Lit. [11]; deutsche Ausgabe: siehe Lit. [10].

[*] Da Hydropräfixe als nicht abtrennbar behandelt werden, kann der Schritt g auch vor Schritt f erfolgen. In diesem Fall gibt es keinen addierten Wasserstoff. Siehe Fußnote zu LG-2.7.

[**] Ergänzung gegenüber der englischen Ausgabe.

[***] Dieser Teil wurde gegenüber der englischen Ausgabe gemäß Regel R-0.1.8.5^[13] (Hydropräfixe sind nicht abtrennbar und deshalb nicht alphabetisch eingeordnet) korrigiert.

- [10] *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* (Hrsg.: Deutscher Zentralausschuss für Chemie), Band 1. Internationale Union für Reine und Angewandte Chemie (IUPAC), Regeln für die Nomenklatur der organischen Chemie, Abschnitte A und B, Verlag Chemie, Weinheim, **1975**; Abschnitt C, VCH, Weinheim, **1990**, Abschnitt F, Verlag Chemie, Weinheim, **1978**.
- [11] *Biochemical Nomenclature and Related Documents* (Hrsg.: International Union of Biochemistry and Molecular Biology), 2. Aufl., Portland Press, London, **1992**.
- [12] „Revised Section F: Natural Products and Related Compounds“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587–643; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/sectionF/>; Publikation mit Ergänzungen und Errata: *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76, 1283–1392; deutsche Ausgabe: *Angew. Chem.*, geplant für 2006; deutsche Ausgabe der vorherigen Fassung in Lit. [10].
- [13] *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**; Korrekturhinweise zur englischen Ausgabe (die in der deutschen Ausgabe weitestgehend berücksichtigt wurden): „Corrections to A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (IUPAC Recommendations 1993)“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 1327–1330; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/biblio/errata.html>; <http://www.iupac.org/reports/1999/7107favre/index.html>.
- [14] „Nomenclature of Organic Chemistry, Section E: Stereochemistry, Recommendations 1974“: *Pure Appl. Chem.* **1976**, 45, 11–30; auch S. 473–490 in Lit. [10] und S. 1–18 in Lit. [11]; siehe Lit. [15] für eine vollständige Beschreibung des R/S-Systems.
- [15] R. S. Cahn, C. K. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem.* **1966**, 78, 413–447; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1966**, 5, 385–415, 511; V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem.* **1982**, 94, 614–631; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1982**, 21, 567–583.
- [16] „Nomenclature of Steroids“: *Pure Appl. Chem.* **1989**, 61, 1783–1822; *Eur. J. Biochem.* **1989**, 186, 429–458; auch Lit. [11], S. 192–221.
- [17] Der Originaltext wurde von der IUPAC-IUBMB Joint Commission on Biochemical Nomenclature (JCBN) betreut. – Dieser Kommission gehörten während der Vorbereitung des Berichts folgende Personen an: R. Cammack (Vorsitzender), S. Boyce (Sekretär), A. J. Barrett, M. A. Chester, A. Cornish-Bowden, H. B. F. Dixon, D. Horton, M. Kanehisa, A. Kotyk, N. Sharon, K. F. Tipton. Sie danken anderen Mitgliedern des Nomenklaturkomitees der IUBMB (R. Apweiler, A. Bairoch, H. Berman, S. Boyce, C. R. Cantor, C. Liébecq, K. L. Loening, A. D. McNaught, G. P. Moss, J. F. G. Vliegenthart) für Ratschläge. G. P. Moss wurde bei der Vorbereitung durch P. K. Agrawal (Indien), D. C. Ayres (Großbritannien), E. Brown (Frankreich), J. R. Bull (Südafrika), J. R. Cole (USA), P. M. Dewick (Großbritannien), J. M. Fang (Taiwan), S. F. Fonseca (Brasilien), O. R. Gottlieb (Brasilien), Y. Kato (Japan), L. H. Klemm (USA), J. Mann (Großbritannien), A. Pelter (Großbritannien), R. Stevenson (USA), J. van der Eycken (Belgien) und D. A. Whiting (Großbritannien) unterstützt. Kommentare und Vorschläge für künftige Revisionen dieser Empfehlungen können an G. P. Moss, Department of Chemistry, Queen Mary and Westfield College, Mile End Road, London, E14NS (Großbritannien) oder an jedes andere Mitglied der Kommission geschickt werden.