

# Überarbeiteter Abschnitt F: Naturstoffe und verwandte Verbindungen\*\*

Obmann: *Hans Schick,\* Obmann: Karl-Heinz Hellwich\**

Übersetzerin: *Kathrin-Maria Roy, Langenfeld*

**B**ei der Benennung von Naturstoffen gab es, hauptsächlich aus historischen Gründen, viele Unklarheiten. Zu Beginn der Naturstoffchemie lag zwischen der Isolierung einer neuen Substanz und ihrer Charakterisierung ein längerer Zeitraum. Daher erhielten Naturstoffe häufig Trivialnamen, die keinen Hinweis auf die Struktur des Moleküls geben und sich im Nachhinein oft als irreführend erwiesen. Auch wenn die ursprünglichen Namen später verbessert wurden, so drückten die neuen Namen die Struktur doch häufig unvollkommen aus und eigneten sich daher nicht für die Nomenklaturopoperationen, die zur Benennung von Derivaten oder Stereoisomeren erforderlich sind. Dies führte zu einer enormen Zunahme von Trivialnamen, die nur das Gedächtnis von Chemikern strapazierten und wichtige Strukturverhältnisse verschleierten. Das so entstandene Durcheinander in der Literatur führte zur Gründung von Fachkommissionen, deren Aufgabe es war, die Benennung von Verbindungen auf verschiedenen miteinander zusammenhängenden Gebieten der Naturstoffchemie wie Steroiden, Lipiden oder Kohlenhydraten zu systematisieren. Die Bemühungen, irreführende oder doppelte Nomenklatur zu beseitigen, waren erfolgreich, soweit den Empfehlungen gefolgt wurde. Ziel der IUPAC Commission on Nomenclature of Organic Chemistry ist es, nach Möglichkeit alle Einzelberichte in einem einzigen Satz von Empfehlungen zu vereinen, der in den meisten Gebieten der Naturstoffchemie angewendet werden kann. Dementsprechend wurden vorläufige Empfehlungen ausgearbeitet und erstmals 1976 als Abschnitt F der IUPAC-Regeln für die Nomenklatur der Organischen Chemie<sup>[1]</sup> und danach in den 1979 herausgegebenen Regeln<sup>[2]</sup> veröffentlicht.

[\*] Prof. Dr. H. Schick  
ASCA GmbH  
Angewandte Synthesechemie Adlershof  
Richard-Willstätter-Straße 12, 12489 Berlin (Deutschland)  
Fax: (+49) 030-6392-4103  
E-mail: schick@asca-berlin.de  
  
Dr. K.-H. Hellwich  
Beilstein-Institut  
Trakheimer Straße 7–9, 60487 Frankfurt (Deutschland)  
Fax: (+49) 69-716731-19  
E-mail: khellwich@beilstein-gmbh.de

[\*\*] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Revised Section F: Natural Products and Related Compounds“ von P. M. Giles, Jr. (USA) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* 1999, 71, 587–643<sup>[10]</sup> vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 1999. Zu dieser Recommendation erschien 2004

eine Berichtigung: siehe *Pure Appl. Chem.* 2004, 76, 1283–1292.<sup>[11]</sup> Beide Texte sind auch im Internet unter den Adressen <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/sectionF/> oder <http://www.iupac.org/reports/1999/7104giles/> und <http://www.iupac.org/publications/pac/2004/7606/7606x1283.html> zugänglich. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation. Die 2004 publizierten Korrekturen und Ergänzungen sind in die Übersetzung vollständig eingearbeitet und mit einem hochgestellten # in Klammern gekennzeichnet. Ein hochgestelltes D in Klammern wiederum kennzeichnet eine Ergänzung in der deutschen Ausgabe gegenüber dem englischen Original. Andere größere Korrekturen und Anmerkungen sind in den Fußnoten zu finden. Die Zuordnung der Beispiele zu den Schemata, die unterschiedliche Schreibweise der Nummern in den Formeln des Haupttextes und des Anhangs (kursiv bzw. steil) und die Wiedergabe der hinter die Ebene weisenden Bindungen durch gestrichelte Linien wurden aus dem Original übernommen.

## Einleitung

Der Abschnitt F der IUPAC-Regeln zur Benennung organischer Verbindungen soll zur Lösung von zwei Problemen beitragen, denen Wissenschaftler, die mit Naturstoffen und verwandten Verbindungen arbeiten, häufig begegnen:

- Eine natürlich vorkommende Verbindung wurde erstmals isoliert, aber ihre Struktur ist noch nicht genau bekannt. Für eine solche Verbindung kann entsprechend den Vorgaben von Regel RF-1 (siehe unten) ein *Trivialname* geprägt werden, um rasch eine einfache Bezugnahme auf sie zu ermöglichen.
- Eine Verbindung wurde isoliert und ihre Struktur bestimmt; ihr *systematischer Name* kann daher gebildet werden. Dieser Name ist jedoch möglicherweise zu umständlich, um ständig in wissenschaftlichen Veröffentlichungen verwendet zu werden. Um diese Schwierigkeit zu umgehen und die Ähnlichkeit mit verwandten Verbindungen zu zeigen, kann in Übereinstimmung mit den Regeln RF-2 bis RF-10 ein *halbsystematischer Name* gebildet werden.

Aus der obigen Erklärung folgen drei Definitionen:

- Ein *Trivialname* ist ein Name, der einer Verbindung mit noch unbekannter Struktur aus Gründen der Bequemlichkeit gegeben wird. Ein derartiger Name enthält keine (oder nur geringe) Strukturinformationen und wird im Allgemeinen von der biologischen Herkunft des Stoffs abgeleitet. Trivialnamen sollten entsprechend Regel RF-1 gebildet werden; dort finden sich auch Empfehlungen, wie ein Trivialname so in einen halbsystematischen Namen umgewandelt werden kann, dass Veröffentlichungen zur entsprechenden Verbindung ohne Schwierigkeiten gefunden werden können.
- Ein *systematischer Name* basiert auf den Abschnitten A–E der IUPAC-Nomenklaturempfehlungen in Lit. [2,3]. Er besteht im Allgemeinen aus Stereodeskriptoren, Präfixen, dem „Stamm“ und zuletzt einem Suffix.
- Ein nach den Regeln RF-2 bis RF-10 gebildeter *halbsystematischer Name* bietet eine vereinfachte Alternative zum systematischen Namen. Dabei wird normalerweise von einer „halbsystematischen Stammverbindung“ ausgegangen. Für die Benennung von Na-

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 („Validation of Methods of Analysis“) ist für Heft 11/2006 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

turstoffen und verwandten Verbindungen gibt es zwei Arten halbsystematischer Stammverbindungen:

- Stammhydride* sind Verbindungen, die keine terminalen Heteroatome oder funktionellen Gruppen haben, also nur aus Gerüst- und Wasserstoffatomen bestehen; sie werden z.B. bei der Nomenklatur von Steroiden,<sup>[4][\*]</sup> Terpenen, Carotinen<sup>[5]</sup> und Alkaloiden verwendet. Die Namen dieser halbsystematischen Stammverbindungen können entsprechend den Regeln der Abschnitte A–D in den IUPAC-Nomenklaturempfehlungen<sup>[2,3]</sup> verändert werden, indem ein Suffix und/oder Präfixe, die Substituenten und Modifikationen der Gerüststruktur kennzeichnen, hinzugefügt werden.
- Funktionsstammverbindungen* sind Verbindungen mit bestimmten terminalen Heteroatomen oder charakteristischen<sup>(#)</sup> Gruppen, wie man sie in Kohlenhydraten, Aminosäuren oder Nucleosiden findet; an die Namen solcher halbsystematischer Stammverbindungen wird normalerweise kein Suffix angefügt.

Bei der Benennung einer neuen Verbindung zieht man aus den vorliegenden Regeln dann den größten Nutzen, wenn man Folgendes beachtet:

- Ist die Struktur nicht bekannt, kann ein Trivialname entsprechend Regel RF-1 gebildet werden.
- Ist die Struktur bekannt und nicht übermäßig kompliziert, sollte die systematische Nomenklatur<sup>[2,3]</sup> verwendet werden.
- Ist die Struktur bekannt und kompliziert, gibt es drei Möglichkeiten:
  - Es gibt bereits einen halbsystematischen Stammnamen, der den größten Teil des Gerüsts der neuen Verbindung beschreibt. Aus diesem Namen sollte der neue Name durch Substitutionsoperationen abgeleitet werden.
  - Es gibt noch keinen halbsystematischen Stammnamen, der den größten Teil des Gerüsts der neuen Verbindung beschreibt, und auch keine diesem Gerüst sehr ähnliche Verbindung. In diesem Fall sollte nach den Regeln RF-2 bis RF-7 ein neuer Stammname geschaffen werden. Um den Namen der neuen Verbindung zu erhalten, ist der Sättigungsgrad nötigenfalls entsprechend Regel RF-8 anzugeben; Präfixe und Suffixe werden nach Regel RF-9 und Stereodeskriptoren nach Regel RF-10 hinzugefügt.
  - Es gibt bereits einen halbsystematischen Namen für eine Verbindung, die mit dem Gerüst der neuen Verbindung zwar nicht identisch, diesem aber sehr ähnlich ist. Für diesen Fall stehen unter Regel RF-4 eine Reihe strukturmodifizierender Präfixe (z.B. Homo- oder Seco-) zur Verfügung. Ausgetauschte Gerüstatome, zusätzliche Ringe (siehe auch RF-9.2<sup>(D)</sup>) und Brücken können mithilfe von RF-5 bis RF-7 beschrieben werden. Solche dem vorhandenen Stamm-

[\*] Die in Lit. [4–8] genannten Quellen sind auch im Internet unter der Adresse <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/> zugänglich.

namen vorangestellte Präfixe modifizieren die Bedeutung so, dass der neue Stammname die Gerüststruktur der neuen Verbindung beschreibt. Danach werden die Regeln RF-8 bis RF-10 angewendet, um den Namen der Verbindung selbst zu bilden.

Im Anhang sind Beispiele für halbsystematische Stammnamen und die zugehörigen Strukturen aufgeführt.

## Regeln

### **Regel RF-1 Von der biologischen Herkunft abgeleitete Trivialnamen**

#### RF-1.1

Wird für eine aus natürlichem Material isolierte Verbindung ein Trivialname benötigt, so sollte dieser nach Möglichkeit von dem Namen der Familie, der Gattung oder der Art abgeleitet werden, aus der die Verbindung isoliert wurde. (Namen, die auf einer vermuteten metabolischen Aktivität der isolierten Substanz beruhen, sollten nicht gebildet werden.) Soweit möglich sollte der Name so gewählt werden, dass er die bekannte oder wahrscheinliche Verbreitung des Naturstoffs widerspiegelt. Beispielsweise könnte eine hypothetische Art *Paradigma exemplare* (Familie Beispieldiae) Substanzen liefern, die nach Beispieldiae, Paradigma oder Exemplare benannt werden. Gegebenenfalls kann auch die Klasse oder die Ordnung herangezogen werden, um den Namen einer Verbindung zu bilden, die in einer Reihe verwandter Familien vorkommt.

#### RF-1.2

Der Trivialname sollte keine falschen Schlüsse auf die Struktur oder die Identität vorhandener Hauptgruppen (ranghöchster funktioneller Gruppen) zulassen.

#### RF-1.3

Die folgenden Buchstabengruppen haben als Endungen in der Nomenklatur organischer Verbindungen Bedeutung und sollten daher nicht als Endungen von Trivialnamen verwendet werden, die für Naturstoffe mit unbekannter Struktur geprägt werden (ausgenommen den nachstehend in Regel RF-3.2.5<sup>[\*]</sup> behandelten Spezialfall).

- -al, -am, -an, -ase<sup>(D)</sup>, -at
- -elid<sup>(D)</sup>, -en, -et
- -ic, -id, -il, -in, -it<sup>(D)</sup>, -ium
- -ol, -on, -ose
- -olid, -osid
- -yd, -yl, -yne<sup>[\*\*]</sup>

#### RF-1.4

Da der Vokal „u“ in der obigen Liste nicht als erster Buchstabe vorkommt, wurde die Endung -un oder -uo gewählt, um Trivialnamen für Verbindungen mit unbekannter Struktur zu kennzeichnen (-un kann als das Symbol für *unbekannt* oder das englische *unknown* angesehen werden). Ein derartiger Name impliziert alle Substituenten einschließlich einer charakteristischen Hauptgruppe; Präfixe oder Suffixe, die Substituenten anzeigen, können daher nicht verwendet werden. Demnach können Substanzen, die aus der oben erwähnten hypothetischen Art *Paradigma exemplare* (Familie Beispieldiae) stammen, als Paradigmun, Exemplarun oder Beispieldun bezeichnet werden.

*Anmerkung:* Früher war für Verbindungen mit unbekannter Struktur die Endung -in gebräuchlich; diese Endung wird jedoch unter Regel RF-1.3 nicht empfohlen, weil sie in der Hantzsch-Widman-Nomenklatur von Ringen (R-2.3.3.1)<sup>[3](#)</sup> Bedeutung hat. (Im Deutschen [und in einigen anderen Sprachen] dient die Endung -in auch zur Kennzeichnung einer Dreifachbindung.)<sup>(D)</sup>

#### RF-1.5

Werden zwei oder mehr Verbindungen aus dem gleichen Material oder durch spätere Trennung einer zuvor als homogen betrachteten Substanz isoliert, so können sie durch Zusatz eines Großbuchstabens, A, B usw., zu einem nach RF-1 bis RF-4 gebildeten Namen unterschieden werden. Weitere Auf trennungen lassen sich durch einen Index an diesen Buchstaben unterscheiden.

#### RF-1.6

Die Namensendungen -un oder -iu sind vorläufig; sie gelten nur, solange eine unbekannte Funktionalität und/oder ein unbekanntes Gerüst vorliegen. Sobald die terminalen Heteroatome und die an das Stammgerüst gebundenen charakteristischen<sup>(#)</sup> Gruppen bekannt sind, wird die Endung in -an oder eine andere passende Endung (siehe RF-3.3) umgewandelt; die terminalen Heteroatome, charakteristischen<sup>(#)</sup> Gruppen und andere Strukturmerkmale sollten wie üblich durch ein Suffix und Präfixe ausgedrückt werden. Erweist sich, beispielsweise, dass die Verbindung Paradigmun vollständig gesättigt ist und eine Oxo- sowie zwei Hydroxygruppen enthält, so wird der Name zu Dihydroxyparadigmanon.<sup>[\*]</sup>

#### RF-1.7

Ist die Struktur eines Naturstoffs vollständig bestimmt und relativ einfach, so sollte der nach den Regeln RF-1.4 bis RF-1.6 festgelegte Trivialname baldmöglichst zugunsten

[\*] Dieser Name ist unvollständig, da er keine Lokanten für die Oxo- und Hydroxygruppen enthält. Um zu einem vollständigen Namen zu gelangen, muss für eine neue Grundstammverbindung (siehe Regel RF-3) auch noch eine sinnvolle Bezifferung festgelegt werden (Regel RF-3.5).

[\*\*] Dieser Verweis wurde gegenüber dem englischen Original korrigiert.

[\*\*] Im Deutschen wird die Endung -in anstelle der Endung -yne verwendet.

eines nach den bestehenden Nomenklaturregeln<sup>[2,3]</sup> gebildeten systematischen Namens aufgegeben werden. Wenn bei einer komplizierteren Struktur aus einer bereits bekannten Stammverbindung leicht ein halbsystematischer Name für den neu charakterisierten Naturstoff abgeleitet werden kann, so sollte der Trivialname zugunsten dieses halbsystematischen Namens aufgegeben werden. Lässt sich keine bereits bekannte Stammverbindung finden, so wird der nach den obigen Regeln gebildete Stammname zu dem einer neuen Stammverbindung, deren Atome entsprechend den nachstehenden Regeln (siehe RF-3.5<sup>(D)</sup>) nummeriert werden.

## RF-1.8

Stellt sich im Nachhinein heraus, dass die Verbindung mit einem bekannten Naturstoff identisch ist, so sollte der später gebildete Trivialname oder halbsystematische Name zugunsten des zuerst beschriebenen oder eines von ihm systematisch abgeleiteten Namens aufgegeben werden. Im letztgenannten Fall sollte der neue Name dem zuerst veröffentlichten möglichst ähnlich sein.

## Regel RF-2 Halbsystematische Nomenklatur für Naturstoffe

Viele natürlich vorkommende Verbindungen gehören zu wohldefinierten Strukturklassen, von denen jede durch eine Reihe von strukturell eng verwandten Stammverbindungen beschrieben werden kann, d.h., jede kann aus einer Grundstruktur durch eine oder mehrere wohldefinierte Nomenklaturopoperationen hergeleitet werden.

## RF-2.1

Ein halbsystematischer Name für eine natürlich vorkommende Verbindung oder ein synthetisches Derivat sollte, wie in RF-3 beschrieben, auf dem Namen einer passenden Grundstammverbindung beruhen. Beispiele für Grundstammverbindungen und Namen für eine Vielzahl von Naturstoffen sind im Anhang aufgeführt.

## RF-2.2

An den Namen einer Grundstammverbindung werden Affixe angefügt, die Folgendes bezeichnen: 1. Änderungen der Gerüststruktur (RF-4, RF-6 und RF-7); 2. Austausch von Gerüstatomen (RF-5); 3. Änderungen des Hydrierungsgrades, den der Name der Stammverbindung impliziert (RF-8); 4. Atome oder Gruppen, die Wasserstoffatome der Stammverbindung substituieren (RF-9); 5. die Konfiguration, wenn sie nicht schon aus dem Namen der Stammverbindung folgt oder wenn sie von der durch den Namen implizierten abweicht (RF-10). Sofern es in den folgenden Regeln nicht anders angegeben ist, werden die Konstruktionsmethoden für Namen und die Nomenklaturregeln<sup>[2,3]</sup> befolgt.

## Regel RF-3 Grundstammverbindungen

### RF-3.1 Allgemeine Richtlinien für die Wahl einer Grundstammverbindung

#### RF-3.1.1

Eine Grundstammverbindung sollte das den meisten Verbindungen dieser Klasse gemeinsame Grundgerüst (einschließlich nichtterminaler Heteroatome und Heterogruppen) wiedergeben.

#### RF-3.1.2

Grundstammverbindungen sollten so gewählt werden, dass aus jeder von ihnen möglichst viele verwandte Naturstoffe durch wohldefinierte Operationen und nach den Nomenklaturregeln<sup>[2,3](D)</sup> abgeleitet werden können.

#### RF-3.1.3

Eine Grundstammverbindung sollte die den Naturstoffen der betrachteten Klasse gemeinsame Konfiguration so vollständig wie möglich implizieren.

### RF-3.2 Für Grundstammverbindungen zugelassene Strukturmerkmale

#### RF-3.2.1

Eine Grundstammverbindung sollte nur ausnahmsweise Ringe enthalten, die zu einer charakteristischen Gruppe wie einem Lacton oder einem cyclischen Acetal gehören. Es gibt aber eine Reihe weit verbreiteter Namen, die charakteristische cyclische Gruppen einschließen, z.B. Spirostan und Cardanolid;<sup>(#)</sup> sie sind nach diesen Regeln erlaubt.

#### RF-3.2.2

Eine Grundstammverbindung sollte keine terminalen Heteroatome oder charakteristischen<sup>(#)</sup> Gruppen enthalten, mit Ausnahme der Bestimmungen in Regel RF-3.2.5.

#### RF-3.2.3

Eine Grundstammverbindung sollte die acyclischen Kohlenwasserstoffgruppen enthalten, die in den meisten Verbindungen dieser Naturstoffklasse vorkommen.

#### RF-3.2.4

Eine cyclische Grundstammverbindung sollte möglichst vollständig gesättigt sein oder die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthalten, wobei dennoch der Sättigungsgrad möglichst vieler verwandter Verbindungen wiederzugeben ist. Diese Regel sollte nicht so strikt angewendet werden, dass viele ungesättigte Bindungen durch Subtraktionssuffixe ausgedrückt oder durch Hydropräfixe entfernt werden müssen.

## RF-3.2.5

Bestimmte große Naturstoffklassen wie Kohlenhydrate, Nucleoside und Aminosäuren<sup>[\*]</sup> sind durch relativ einfache, aber hoch funktionalisierte Einheiten und deren Oligomere und Polymere charakterisiert. Für diese Klassen von Verbindungen, die als Funktionsstammverbindungen (siehe Einleitung) bezeichnet werden, gelten die Bestimmungen von RF-3.2.2 insofern nicht, als hier Grundstammverbindungen auch funktionelle Gruppen enthalten können.

## RF-3.3

Ein halbsystematischer Name für eine Grundstammverbindung sollte möglichst von einem nach Regel RF-1 gebildeten Trivialnamen abgeleitet werden. Die anstelle von -un oder -iun zu verwendenden Endungen sollten den folgenden Richtlinien gehorchen:

- a) -an, wenn die gesamte Verbindung gesättigt ist;
- b) -en, wenn der cyclische Teil oder die Hauptkette des acyclischen Teils der Verbindung oder beide die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthalten;
- c) -aran, wenn eine sonst völlig gesättigte Verbindung einen oder mehrere Einzelringe mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthält. Die meisten Beispiele für derartige Verbindungen haben bereits Namen mit der Endung -an (siehe die folgende Anmerkung) oder sind Alkaloide, deren Namen auf -in enden, z.B. Ergolin, Aspidospermidin und Strychnidin.

*Anmerkung 2 :[\*\*]* Die Endung -an wurde für die Namen einiger partiell ungesättigter heterocyclischer Stammverbindungen verwendet, z.B. Morphinan, Rheadan, Yohimban. Auch wenn die Endung -aran für Verbindungen dieses Typs vorgeschlagen wird, ist für bereits eingeführte Namen keine Änderung in -aran erforderlich. Allerdings kann bei derartigen Verbindungen die Endung -an nicht verwendet werden, um vollständig gesättigte Derivate zu benennen; diese müssen mit Hydropräfixen beschrieben werden (siehe RF-6).

## RF-3.4

Durch die Angabe von indiziertem Wasserstoff gemäß Regel A-21.6<sup>[2]</sup> und R-1.3<sup>[3](#)</sup> können Isomere von Grundstammverbindungen beschrieben werden, die in einem Ringsystem mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen oder einem entsprechenden Teil eines Ringsystems gesättigte Gerüstatome enthalten (siehe auch RF-5.4)<sup>(D)</sup>.

## RF-3.5 Bezifferung von Grundstammverbindungen

## RF-3.5.1

Um die Gerüstatome einer Grundstammverbindung zu nummerieren, verwendet man das für eine Gruppe strukturell verwandter Naturstoffe bestehende Nummerierungssystem, sofern dieses alle Gerüstatome erfasst.

## RF-3.5.2

Wenn für die Verbindungen einer Gruppe strukturell verwandter Naturstoffe kein Nummerierungssystem besteht, wird die Grundstammverbindung nach den folgenden Richtlinien beziffert:

- a) Im Gerüst wird das bevorzugte Ringsystem entsprechend den Kriterien von Regel C-0.14<sup>[2]</sup> bestimmt. Die Nummer 1 wird dem Atom des bevorzugten Ringsystems zugeordnet, das nach dessen systematischer Bezifferung die Nummer 1 haben würde.
- b) Alle Gerüstatome des bevorzugten Ringsystems einschließlich der Atome an Anellierungsstellen in anellierten Ringsystemen erhalten, beginnend mit dem Atom mit der Nummer 1, aufeinanderfolgende arabische Nummern in der Zählrichtung, die für die systematische Bezifferung des Ringsystems vorgeschrieben ist.
- c) Acyclische Substituenten an den Gerüstatomen von Ringkomponenten und acyclische Verbindungsstücke werden jeweils als Ganzes mit ihren Verzweigungen beziffert, und zwar in der Reihenfolge steigender Nummern der Gerüstatome, an die sie gebunden sind.
- d) Gerüstatome von acyclischen Verbindungsstücken zu anderen Ringen oder Ringsystemen werden fortlaufend nummeriert, und zwar ausgehend von dem Atom, das dem bevorzugten Ringsystem am nächsten liegt. Danach folgen die Gerüstatome der anderen Ringe oder Ringsysteme wie in (b) vorgeschrieben. Sind zwei oder mehr acyclische Verbindungsstücke zu anderen Ringen oder Ringsystemen vorhanden, wird dasjenige zuerst beziffert, das im bevorzugten Ringsystem an die niedrigstnummelierte Position gebunden ist, danach der mit diesem Verbindungsstück verknüpfte Ring und anschließend das acyclische Verbindungsstück an der nächsthöher nummerierten Position im bevorzugten Ring oder Ringsystem usw.
- e) Bei zwei Gruppen in geminal-disubstituierter Stellung wird diejenige mit den meisten Gerüstatomen zuerst beziffert; besteht dann noch eine Wahlmöglichkeit, ist den Richtlinien von Regel C-15(c)–(e)<sup>[2]</sup> zu folgen. Sind die beiden Gruppen danach identisch und an eine korrekt gezeichnete cyclische Struktur (siehe Anhang) gebunden, wird die Gruppe in der  $\alpha$ -Position zuerst beziffert (siehe RF-10.1<sup>(#)</sup>); sind die beiden Gruppen identisch und endständig an eine Doppelbindung in einem acyclischen Teil der Struktur gebunden, <sup>(#)[\*]</sup> wird die Gruppe in *trans*-

[\*] Gegenüber dem englischen Original korrigiert.

[\*\*] Eine vorausgehende Anmerkung 1 im englischen Original betrifft das terminale e und ist im Deutschen ohne Belang. Sie wurde daher nicht übersetzt.

[\*] Wenn zwei gleiche Gruppen geminal an eine Doppelbindung gebunden sind, kann es sich nur um eine Doppelbindung am Ende einer Kette handeln.

Stellung zur Hauptkette entsprechend Regel 12.4 der Empfehlungen für Carotinoide<sup>[5]</sup> zuerst beziffert.

## RF-3.6 Bezeichnung einzelner Ringe

Bestimmte stammsystemmodifizierende Präfixe (siehe Regel RF-4) für Namen von Grundstammverbindungen wurden mit einer Ringkennung anstelle von spezifischen Lokanten für Gerüstatome verwendet (siehe Schema 2, 7 und 19). Entsprechend hat sich die Kennzeichnung einzelner Ringe bei einigen der gängigeren Naturstoffe eingebürgert. Da jedoch in den hier vorliegenden Empfehlungen Strukturänderungen durch Lokanten für Gerüstatome und nicht durch Buchstaben bezeichnet werden (eine Ausnahme bildet der Wegfall eines terminalen Rings, siehe RF-4.6), wurde nicht versucht, Ringe mithilfe eines Buchstabensystems zu kodieren. Um aber einen Zusammenhang zur Verwendung des Buchstabensystems herzustellen, sind Namen mit Buchstaben zur Ringkennzeichnung angegeben, wo es zweckmäßig ist.

## RF-3.7 Die Konfiguration von Grundstammverbindungen

Ohne weitere Spezifizierung impliziert der Name der Grundstammverbindung die gleichen absoluten Konfigurationen an allen Chiralitätszentren und die gleichen Konfigurationen an Doppelbindungen wie in der Naturstoffgruppe, von der er abgeleitet wurde, wenn es in diesen Regeln oder in Regeln für bestimmte Naturstoffklassen nicht anders angegeben ist. Die Formeln im Anhang zeigen die Konfiguration vieler Grundstammverbindungen. In einigen Fällen wird die Konfiguration an einem Chiralitätszentrum nicht durch den Stammnamen impliziert und muss daher immer angegeben werden.

## Regel RF-4 Gerüstmodifikationen von Grundstammverbindungen

### RF-4.1 Wegfall von Gerüstatomen ohne Einfluss auf die Zahl der Ringe

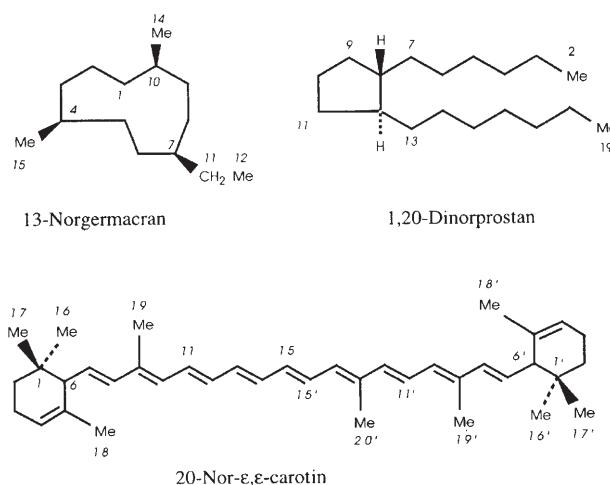
#### RF-4.1.1

Der Wegfall eines unsubstituierten gesättigten oder ungesättigten Gerüstatoms in einem Ring oder eines unsubstituierten Gerüstatoms im acyclischen Teil einer Grundstammverbindung mit dem/den zugehörigen Wasserstoffatom(en) wird mit dem Präfix Nor- beschrieben; das Fehlen von zwei oder mehr Gerüstatomen wird durch die Kombination von Nor- mit dem entsprechenden numerischen Präfix ausgedrückt: Dinor-, Trinor- usw.

*Anmerkung 1:* Die vorläufigen Regeln von Abschnitt F<sup>[1,2]</sup> legten fest, dass die wegfällenden Gerüstatome gesättigte Kohlenstoffatome sein müssen, da gemäß dieser Regeln das Präfix Nor- fehlende Methylengruppen anzeigt (siehe Regeln F-4.2 und F-4.4)<sup>(D)</sup>. Die Empfehlungen für Carotinoide (5.1)<sup>(#)(5)</sup> bestimmen, dass Nor- auch für fehlende CH-Gruppen verwendet werden kann. Diese überarbeiteten Empfehlungen sind genauer, da sie den Wegfall von CH-Gruppen auch<sup>[\*]</sup> in einem Ring mit der maximalen Zahl nichtkumulierte Doppelbindungen zulassen; sie sind zugleich allgemeiner, weil durch Nor- auch fehlende Heteroatome angezeigt werden können.

*Anmerkung 2:* Von der üblichen Verwendung des Präfixes Nor- in Norbornan, um das Fehlen dreier Methylgruppen anzudeuten, wird abgeraten. Keinesfalls sollte eine solche Verwendung auf irgendein anderes monoterpenoides System übertragen werden.<sup>(#)(\*\*)</sup>

Die Position des weggefallenen Gerüstatoms ist in jedem Fall durch seinen Lokanten gemäß der Bezifferung der Stammverbindung anzugeben (Beispiele: Schema 1).



**Schema 1.** Anwendung der Regel RF-4.1.1.

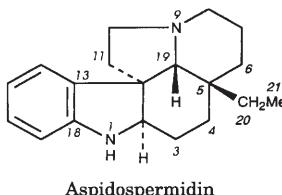
*Anmerkung:* Um das Fehlen von Methylengruppen in einem bestimmten Ring zu kennzeichnen, wurden Präfixe wie Nor- oder Dinor- zusammen mit einem Großbuchstaben und gegebenenfalls in Verbindung mit dem Lokanten für das Gerüstatom verwendet. Dieses System wurde in der zweiten Ausgabe der Steroidnomenklatur (Regel 2S-7.1<sup>[9]</sup>) empfohlen<sup>(#)</sup> und wird noch immer in der *Chemical Abstracts-Indexnomenklatur* verwendet, ist aber nicht in Abschnitt F enthalten, weil es nicht so allgemein anwendbar ist wie das hier empfohlene Lokantensystem.

Auch wenn durch Wegfallen eines beliebigen Gerüstatoms ein eindeutiger Name gebildet werden kann, weil der Lokant für jedes fehlende Gerüstatom angegeben wird, ist es üblich, die Gerüstatome mit der höchstmöglichen Nummer in einem Atomkonnektor im cyclischen Teil einer Gerüststruktur zu entfernen. Ein Atomkonnektor ist eine Kette gleichartiger Gerüstatome des gleichen Elements, die eine beliebige Kombination aus Brückenkopf- oder Ringverknüpfungsatomen, Ringen oder Ringsystemen (d.h. Ringverbänden), substituierten Gerüstatomen in der Stammverbindung oder

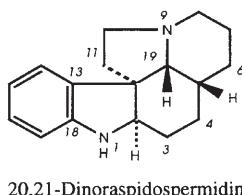
[\*] Das Wort „only“, das sich im englischen Original fand, wurde durch „auch“ ersetzt, da sonst der Text der Anmerkung im Widerspruch zum Regeltext und zur zitierten Regel der Carotinoidnomenklatur gestanden hätte.

[\*\*] Diese Regel wurde bereits 1976 veröffentlicht (Regel F-4.2<sup>[1,2]</sup>) und war dort deutlicher formuliert. Auch der Text in der Fassung von 1999 war noch näher an der Fassung von Regel F-4.2.

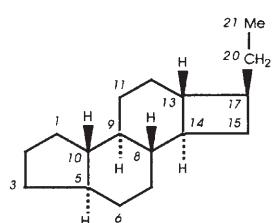
Heteroatomen verknüpft. Im acyclischen Teil einer Gerüststruktur fällt vorzugsweise dasjenige Gerüstatom eines acyclischen Atomkonnektors oder eines terminalen Segments weg, das dem freien Ende des acyclischen Teils der Struktur am nächsten liegt. (Dies geschieht, um die übliche Bezeichnung von Strukturmerkmalen der Verbindung und ihrer Derivate so weit wie möglich beizubehalten.) Ein terminales Segment einer Gerüststruktur ist ein acyclischer Abschnitt gleichartiger Gerüstatome, der nur an einem Ende an die Strukturmerkmale gebunden ist, die Atomkonnektoren begrenzen (siehe oben) (Beispiele: Schema 1 und 2).



Aspidospermidin



20,21-Dinoraspispermidin

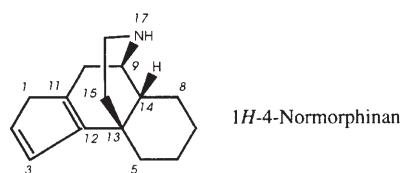


4,16,18,19-Tetranor-5 $\alpha$ -pregnan  
(wurde früher A,D(15),18,19-Tetranor-5 $\alpha$ -pregnan genannt)

**Schema 2.** Weitere Anwendung der Regel RF-4.1.1.

#### RF-4.1.2

Führt der Wegfall eines ungesättigten Gerüstatoms aus einem Ring mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen in der Grundstammverbindung zu einer gesättigten Ringposition, so wird diese durch indizierten Wasserstoff gekennzeichnet (Beispiel: Schema 3).<sup>(#)</sup>



**Schema 3.** Anwendung der Regel RF-4.1.2.

#### RF-4.2 Hinzufügen von Gerüstatomen ohne Einfluss auf die Zahl der Ringe

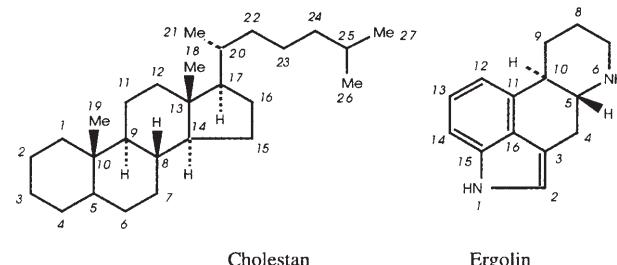
##### RF-4.2.1

Eine zusätzliche Methylengruppe ( $-\text{CH}_2-$ ) zwischen zwei Gerüstatomen einer Grundstammverbindung wird mit dem Präfix Homo- bezeichnet; zwei oder mehr zusätzliche Methylengruppen werden durch eine Kombination des entsprechenden numerischen Präfixes mit Homo- angegeben: Dihomo-, Trihomo- usw. Die Positionen der eingeschobenen Methylengruppen werden durch deren Lokanten charakterisiert, die vor den Präfixen Homo-, Dihomo- usw. genannt werden.

*Anmerkung:* Um den Einschub einer Methylengruppe in bestimmte Ringe zu kennzeichnen, wurden Großbuchstaben, gegebenenfalls mit den Lokanten für die zugefügten Methylengruppen, zusammen mit Präfixen wie Homo- und Dihomo- verwendet. Dieses System wird für die *Chemical Abstracts*-Indexnomenklatur verwendet, ist aber nicht in Abschnitt F enthalten, weil es nicht so allgemein anwendbar ist wie das hier empfohlene Lokantsystem.

#### RF-4.2.2 Nummerierung zusätzlicher Gerüstatome<sup>(#)</sup>

Die Zuweisung des Lokanten für eine zusätzliche Methylengruppe hängt davon ab, ob diese als Einschub in einen Atomkonnektor, in ein terminales acyclisches Segment (siehe auch RF-4.1.1) oder in einen Bindungskonnektor angesehen wird. Ein Bindungskonnektor ist eine Verknüpfung zwischen jeder beliebigen Kombination aus Brückenkopf- oder Ringverknüpfungsatomen, Ringen oder Ringsystemen (d.h. Ringverbänden), substituierten Gerüstatomen oder Heteroatomen. In Schema 4 sind für zwei Verbindungen Atomkonnektoren, Bindungskonnektoren und terminale Segmente exemplarisch angegeben.



Cholestan

Ergolin

Atomkonnektoren	1–4, 6–7, 11–12, 15–16 und 22–24	2, 4, 7–9 und 12–14
terminale Segmente	18, 19, 21, 26 und 27	keine
Bindungskonnektoren	5–10, 8–9, 8–14, 9–10, 13–14, 13–17 und 17–20	1–15, 3–16, 5–6, 5–10, 10–11, 11–16 und 15–16

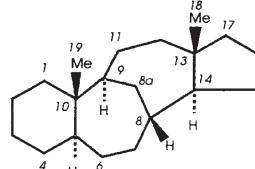
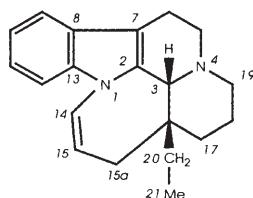
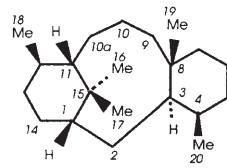
**Schema 4.** Definition von Atomkonnektoren, terminalen Segmenten und Bindungskonnektoren an zwei Beispielen.

#### RF-4.2.2.1

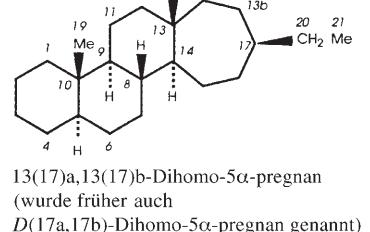
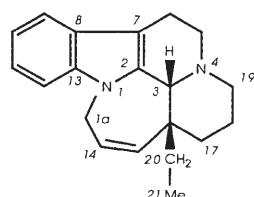
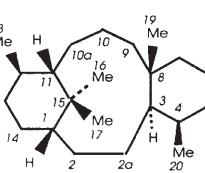
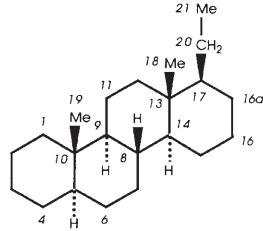
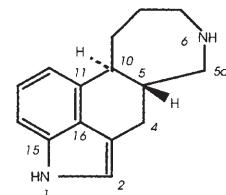
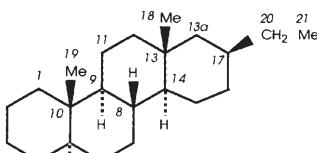
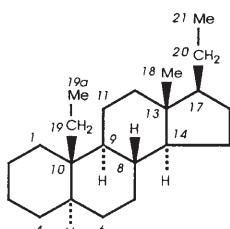
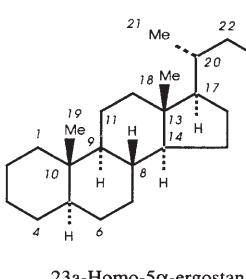
In einen Atomkonnektor oder ein terminales Segment eingeschobene Methylengruppen werden gekennzeichnet, indem in Einklang mit der Lage der in der Verbindung verbleibenden Doppelbindungen an die höchste Gerüstatomnummer des Atomkonnektors bzw. terminalen Segments ein Buchstabe a, b usw. angefügt wird (siehe die zweite Verbindung in Schema 5 und die dritte in Schema 6). Gibt es äquivalente Atomkonnektoren, so wird der Atomkonnektor mit der höchsten Nummer gewählt und die Methylengruppe nach dem höchstnummierierten Gerüstatom in diesen Konnektor eingeschoben (Beispiele: Schema 5 und 6<sup>[\*]</sup>).

*Anmerkung:* Alternativ kann das Hinzufügen von Seitenketten oder das Erweitern terminaler Segmente einer

[\*] Die Bezeichnung des Homoergostans in Schema 6 wurde gemäß Regel 3S-1.1<sup>[4]</sup> gegenüber dem englischen Original korrigiert.



**Schema 5.** Anwendung der Regel RF-4.2.2.1.



**Schema 7.** Anwendung der Regel RF-4.2.2.2.

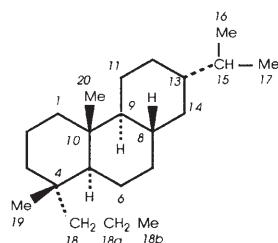
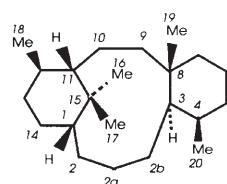
**Anmerkung:** Der Einschub einer Methylengruppe in einen Bindungskonnektor wurde beschrieben, indem der/die Großbuchstabe(n) des/der erweiterten Ringe(s) mit dem Lokanten für das eingeschobene Atom kombiniert wurde(n). Dieser Lokant wurde erhalten, indem ein Buchstabe a, b usw. an die Nummer eines der den Ringbindungskonnektoren begrenzenden Gerüstatome angehängt wurde (gemäß Regel 2S-7.4<sup>[9](#)</sup>); siehe letztes Beispiel in Schema 7.

## RF-4.2.3

Durch den Einschub einer Methylengruppe in den Ring oder das Ringsystem einer Grundstammverbindung mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen oder in ein cyclisches System konjugierter Doppelbindungen kann eine gesättigte Ringposition entstehen, die durch indizierten Wasserstoff gekennzeichnet wird. Die Position der eingeschobenen Methylengruppe wird anhand RF-4.2.2 ermittelt, auch wenn sich die gesättigte Ringposition dann an einer anderen Stelle im ungesättigten Ringsystem befindet; diese Stelle wird durch den entsprechenden Lokanten für den indizierten Wasserstoff charakterisiert (Schema 8).

**Anmerkung 1:** Obwohl es recht einfach zu begründen wäre, den indizierten Wasserstoff wegzulassen, wenn die gesättigte Position identisch mit der der eingeschobenen Methylengruppe ist, sollte dies nicht getan werden.

**Anmerkung 2:** Der Name 20H-20a-Homoporphyrin beschreibt eine andere tautomere Form des Homoporphyrins von Schema 8, nämlich die in Schema 9 gezeigte.

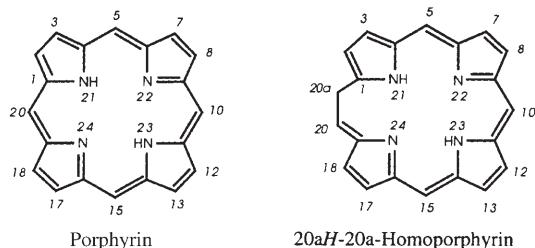


**Schema 6.** Weitere Anwendung der Regel RF-4.2.2.1.

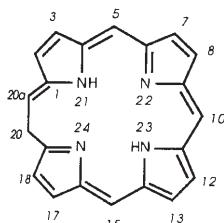
bereits an das Grundgerüst der Grundstammverbindung gebundenen Seitenkette mit den Regeln der Substitutionsnomenklatur beschrieben werden.

## RF-4.2.2.2

In einen Bindungskonnektor eingeschobene Methylengruppen werden gekennzeichnet, indem als Lokanten beide Nummern der den Bindungskonnektor begrenzenden Gerüstatome angegeben werden, wobei die zweite (höhere) Nummer in Klammern steht. Darauf folgt ein Buchstabe a, b usw. entsprechend der Zahl der eingefügten Methylengruppen (Beispiele: Schema 7).



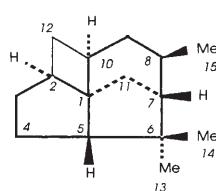
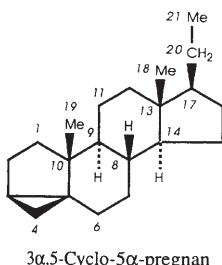
**Schema 8.** Anwendung der Regel RF-4.2.3 auf ein Homoporphyrin.



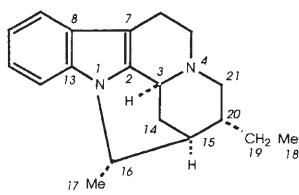
**Schema 9.** Struktur des als 20H-20a-Homoporphyrin bezeichneten Tautomers.

#### RF-4.3 Bindungsbildung

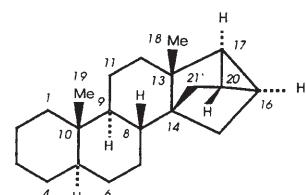
Die Schaffung eines zusätzlichen Rings durch das direkte Verbinden zweier beliebiger Atome einer Grundstammverbindung wird durch das Präfix Cyclo- ausgedrückt, vor dem als Lokanten die Nummern der so verknüpften Gerüstatome stehen. Gegebenenfalls wird die Konfiguration der durch die neue Bindung geschaffenen Chiralitätszentren wie unter RF-10 beschrieben mit  $\alpha$ ,  $\beta$  oder  $\xi$  bezeichnet (Beispiele: Schema 10 und 11).



**Schema 10.** Anwendung der Regel RF-4.3. *Anmerkung:* In der Darstellung des Cyclopregnans ist die Cyclobindung relativ zu den drei anderen Bindungen in  $\alpha$ -Position. Die Nummern der Methylgruppen an Position 6 des Cycloedrancs waren in den vorläufigen Abschnitt-F-Regeln<sup>[1,2]</sup> umgekehrt.



(16 $\beta$ H)-1,16-Cyclocorynan( $^{\ddagger}$ )  
(siehe RF-4.5.1 zur Verwendung von  $\beta H$ )



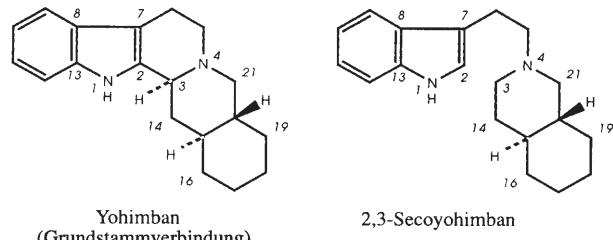
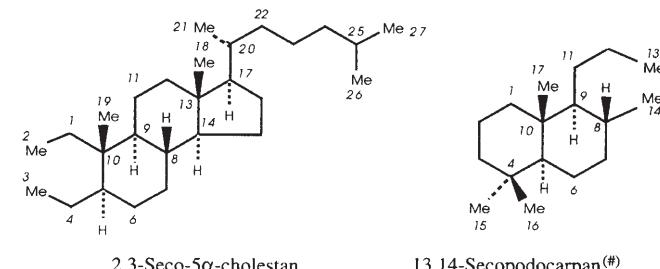
(20S)-14,21:16 $\beta$ ,20-Dicyclo-5 $\alpha$ ,14 $\beta$ -pregnane (siehe RF-10.2.1 zur Verwendung von  $\beta$  an Position 14)

**Schema 11.** Weitere Anwendung der Regel RF-4.3.

#### RF-4.4 Bindungsbruch

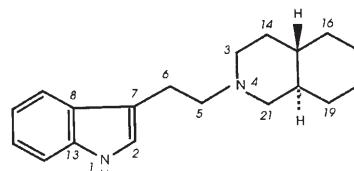
##### RF-4.4.1

Der Bruch einer Ringbindung (gesättigt oder ungesättigt) unter Hinzufügen der entsprechenden Zahl von Wasserstoffatomen an jeder so entstandenen neuen terminalen Gruppe wird durch das Präfix Seco- und die Lokanten für die gespaltene Bindung angezeigt. Die ursprüngliche Nummerierung bleibt erhalten (Beispiele: Schema 12 und 14).



**Schema 12.** Anwendung der Regel RF-4.4.1.

*Anmerkung:* ( $^{\ddagger}$ ) Die Konfiguration an den Positionen 15 und 20 von 2,3-Secoyohimban (Schema 12) ist dieselbe wie in Yohimban. Eine andere zeichnerische Darstellung dieses Molekülteils, wie in Schema 13, kann dazu führen, dass die

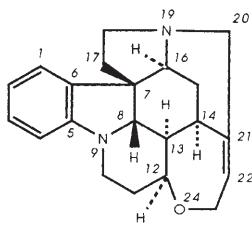


**Schema 13.** Alternative Darstellung von 2,3-Secoyohimban.

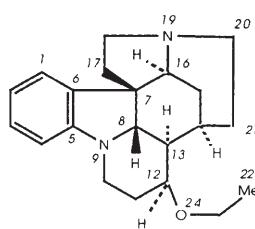
Wasserstoffatome in den Positionen 15 und 20 scheinbar auf der anderen Seite stehen, obwohl dieselbe absolute Konfiguration vorliegt. Es wird empfohlen, die Konfiguration veränderter oder neuer, durch Substituenten entstehender Chiralitätszentren<sup>[\*]</sup> solcher Seco-Verbindungen mithilfe des R/S-Systems anzugeben.

Diese Situation wurde bei den Empfehlungen für die Benennung von Vitamin-D-Verbindungen (9,10-Secosteroi-

[\*] Der Text wurde sinngemäß geändert, da es nicht um die „Konfiguration von Substituenten“ geht, wie es im englischen Original wörtlich heißt.



Strychnidin  
(Grundstammverbindung)



21,22-Secostrychnidin

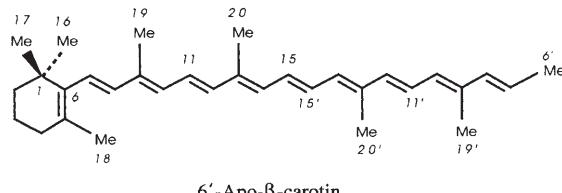
**Schema 14.** Weitere Anwendung der Regel RF-4.4.1.

de;<sup>[6]</sup> siehe auch Regel 3S-8.2<sup>[4](D)</sup>) berücksichtigt, in denen Sequenzregeldeskriptoren (*R/S*) zur Kennzeichnung der Konfiguration in Ring A empfohlen werden, da diese Verbindungen oft in einer anderen Orientierung gezeichnet werden.

## RF-4.4.2

Das nicht kursiv gesetzte Präfix Apo- mit vorangestelltem Lokanten wird verwendet, um anzudeuten, dass die Seitenkette einer Grundstammverbindung jenseits des Gerüstatoms mit der entsprechenden Nummer ganz fehlt.<sup>[\*]</sup> Das Fehlen von zwei oder mehr Seitenketten wird durch die Präfixe Diapo-, Triapo- usw. mit den zugehörigen vorangestellten Lokanten gekennzeichnet. Im verbliebenen Restmolekül wird die Nummerierung der Gerüstatome in der Stammverbindung beibehalten.

Anmerkung: Dieses Verfahren wird nur in der Carotinoidnomenklatur<sup>[5]</sup> verwendet<sup>(#)</sup> (Beispiel: Schema 15).



6'-Apo-β-carotin

**Schema 15.** Anwendung der Regel RF-4.4.2.

## RF-4.5 Bindungswanderung

Stammverbindungen, die keine einfachen Derivate von anerkannten Grundstammverbindungen sind, aber so betrachtet werden können, als seien sie aus diesen durch Wanderung einer oder mehrerer Bindungen hervorgegangen, können nach den folgenden Methoden benannt werden.

### RF-4.5.1

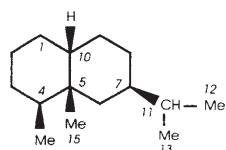
Das Präfix  $x(y \rightarrow z)$ -Abeo- bezeichnet die Wanderung eines Endes einer Einfachbindung von seiner ursprünglichen Position in einer Grundstammverbindung an eine andere

[\*] Das heißt, dass das Atom mit dem Lokanten vor dem Präfix Apo- entsprechenden Nummer das letzte im Molekül verbleibende Atom ist.

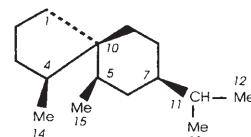
Position. In diesem Präfix ist  $x$  der Lokant für das stationäre, d.h. unveränderte Ende der wandernden Bindung,  $y$  der für die Position des bewegten Endes der wandernden Bindung in der Grundstammverbindung und  $z$  der für die Position des bewegten Endes der wandernden Bindung in der Endstruktur. Die Bezeichnung der Grundstammverbindung bleibt in der neuen Verbindung erhalten.

Anmerkung:<sup>(#)</sup> Früher wurde das Präfix Abeo- kursiv gesetzt.<sup>[1-4]</sup> Aus Gründen der Einheitlichkeit mit den anderen stammsystemmodifizierenden Präfixen wird jetzt empfohlen, dieses Präfix nicht kursiv zu setzen.<sup>[\*]</sup> Diese Änderung wurde nicht in die Nomenklatur der Lignane und Neolignane<sup>[8]</sup> übernommen. Die hier beschriebene Verwendung des Präfixes Abeo- ist zwar zugelassen, jedoch 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.

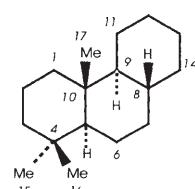
Die Konfiguration der Grundstammverbindung bleibt erhalten. Die Konfiguration neuer Chiralitätszentren an Ringatomen, die noch ein Wasserstoffatom tragen, wird nach dem  $\alpha/\beta$ -System oder, falls erforderlich, nach dem Sequenzregelverfahren (*R/S*) angegeben. Die Ausrichtung des Wasserstoffatoms unterhalb ( $\alpha$ ) oder oberhalb ( $\beta$ ) die Bezugs Ebene des Ringsystems wird mit dem zugehörigen Symbol und einem kursiv gesetzten Großbuchstaben *H* nach dem Lokanten für das Ringatom in der Verbindung angegeben. Diese gesamten Angaben stehen in Klammern und werden am Anfang des Namens der gesamten Verbindung aufgeführt.<sup>[\*\*]</sup> Die Konfiguration weiterer neuer Chiralitätszentren wird nach dem Sequenzregelsystem beschrieben (Beispiele: Schema 16, 34<sup>(D)</sup> und 39<sup>(D)</sup>).



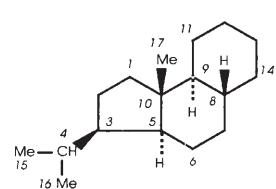
Eremophilan  
(Grundstammverbindung)



(10*R*)-4(5→10)-Abeoeremophilan



Podocarpan  
(Grundstammverbindung)



(3*α*H)-5(4→3)-Abeopodocarpan

**Schema 16.** Anwendung der Regel RF-4.5.1.

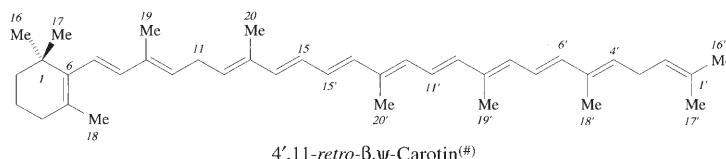
[\*] Die Steilschreibung hat zur Folge, dass das Präfix Abeo- bei der alphabetischen Einordnung berücksichtigt wird, ihm ein Bindestrich vorausgeht, jedoch keiner folgt, wenn kein Lokant nachfolgt, und es am Anfang eines Namens groß geschrieben wird.

[\*\*] Das Satzende wurde gemäß den Beispielen in Schema 34 und 39 gegenüber dem englischen Original korrigiert.

Anmerkung: Die Bindungswanderung Podocarpan → Abeopodocarpan (Schema 16) ist auch mit dem Präfix A-Neo- beschrieben worden. Die Abeo-Operation ist aber vorzuziehen, da sie allgemeiner ist.

#### RF-4.5.2

Das kursiv gesetzte Präfix *retro-*, dem ein Lokantenpaar vorausgeht, kennzeichnet die Verschiebung aller Einfach- und Doppelbindungen um eine Position in einem konjugierten Polyensystem, das durch die beiden Lokanten genau beschrieben wird. Diese bezeichnen Atome, die nicht Teil eines Systems mit der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen in einem Ring oder Ringsystem sind. Der erste Lokant gibt das Gerüstatom an, das ein Wasserstoffatom abgegeben hat, und der zweite dasjenige, das ein Wasserstoffatom hinzubekommen hat. So wird das Präfix *retro-* nur zur Benennung von Carotinoïden<sup>[5]</sup> verwendet<sup>(#)</sup> (Beispiel: Schema 17).



Schema 17. Anwendung der Regel RF-4.5.2.

Anmerkung 1: Das Präfix *retro-* wurde in der Steroidnomenklatur verwendet, um eine  $9\beta,10\alpha$ -Konfiguration anstelle der implizierten Konfiguration zu bezeichnen. Eine solche Verwendung wird aber nicht empfohlen.

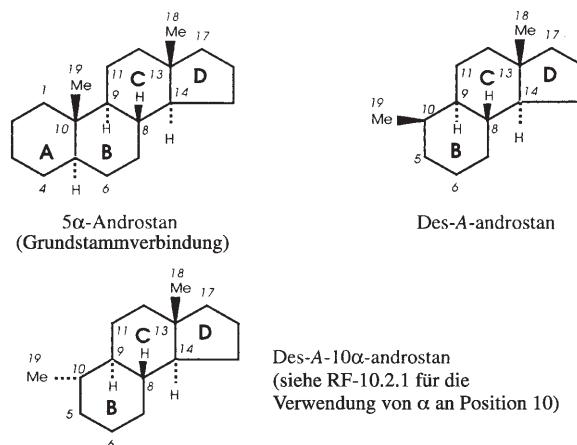
Anmerkung 2: Das Präfix *retro-* wird auch für ein Peptid verwendet, dessen Aminosäuresequenz gegenüber der des natürlich vorkommenden Peptids umgekehrt ist.

#### RF-4.6 Wegfall eines terminalen Rings

Der Wegfall eines terminalen Rings der Grundstammverbindung eines Naturstoffs unter Zusatz der entsprechenden Zahl von Wasserstoffatomen an jeder Verknüpfungsstelle zum benachbarten Ring wird mit dem Präfix Des- und dem kursiv gesetzten Großbuchstaben für den fehlenden Ring gekennzeichnet (siehe RF-3.6). Die durch den Namen der Grundstammverbindung implizierte Konfiguration bleibt die gleiche, sofern nichts anderes angegeben ist. Die Nummerierung der Gerüstatome in der Stammverbindung wird in der modifizierten Verbindung beibehalten (Beispiele: Schema 18). Die Verwendung des Präfixes Des- in diesem Sinne ist auf Steroide beschränkt (siehe Regel 3S-7.2<sup>[4]</sup>).<sup>(#)</sup>

#### RF-4.7 Kombination von Präfixen zur Modifizierung einer Grundstammverbindung

Die Veränderungen einer Grundstammverbindung, die durch die Präfixe in den Empfehlungen RF-4.1 bis RF-4.4, d.h. ohne die Berücksichtigung von Brücken, Anellierung



Schema 18. Anwendung der Regel RF-4.6.

und abtrennbaren Präfixen,<sup>(#)[\*]</sup> beschrieben sind, können miteinander kombiniert werden, um noch stärkere Änderungen einer Struktur wiederzugeben. Die durch jedes Präfix bezeichnete Operation wird schrittweise auf die Grundstammverbindung angewendet, indem man „rückwärts vorgeht“, d.h. ausgehend vom Namen der Grundstammverbindung von rechts nach links. Die folgenden Empfehlungen sind keine strikten Regeln zur Wahl eines einzigen Namens, sondern als Richtlinien gedacht, um Präfixkombinationen und die Reihenfolge ihrer Nennung bei der Bildung eines eindeutigen Namens auszuwählen.

#### RF-4.7.1

Können die gleichen Veränderungen einer Struktur durch unterschiedliche Präfixkombinationen beschrieben werden, so sollte die Kombination gewählt werden, die die wenigsten Operationen ausdrückt. Dabei werden sowohl abtrennbare (z.B. Alkyl-) als auch nichtabtrennbare Präfixe (z.B. Homo- oder Nor-) für die Kennzeichnung von Modifikationen berücksichtigt, wobei nichtabtrennbare<sup>[\*\*]</sup> Präfixe bevorzugt werden. Dihomo-, Dinor- usw. werden jeweils als zwei Operationen behandelt (siehe Regel 3S-6.3<sup>[4]</sup>).<sup>(#)</sup> Ist die Zahl der Operationen gleich, so ist die Kombination Homo-/Nor- der Kombination Cyclo-/Seco- vorzuziehen; die Wahl zwischen anderen Kombinationen für die gleiche Zahl von Operationen erfolgt nach alphabetischer Reihenfolge der Präfixe (Beispiel: Schema 19).

#### RF-4.7.2

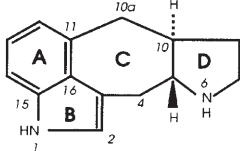
Die Reihenfolge der Nennung von stammsystemmodifizierenden Präfixkombinationen muss eine ungeeignete Verwendung der oben definierten Präfixe ebenso vermeiden wie unmögliche Situationen, wenn die zugehörigen Operationen

[\*] Der Ersatz von Gerüstatomen durch Heteroatome wird in Regel RF-5 behandelt und hier ebenfalls nicht berücksichtigt.

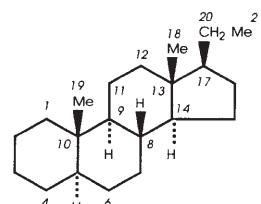
[\*\*] Der Text wurde gegenüber der englischen Fassung gemäß Regel 3S-6.3 korrigiert, wonach (bei gleicher Zahl von Operationen) die nichtabtrennbaren Präfixe bevorzugt sind.

# IUPAC-Empfehlungen

in der wie oben vorgeschriebenen Weise durchgeführt werden  
(Beispiel: Schema 20<sup>[\*]</sup>).

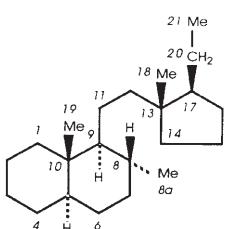


10(11)-alpha-Homo-9-norergolin  
[nicht (9alphaH)-5,9-Cyclo-5,10-secoergolin<sup>(#)</sup>  
oder (9alphaH)-5(10 → 9)-Abeoergolin<sup>(#)</sup>  
[wurde früher auch  
C(10a)-Homo-D-norergolin genannt]

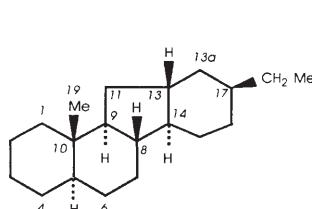


5-alpha-Pregnan (Grundstammverbindung)

Schema 19. Anwendung der Regel RF-4.7.1.



8a,14-Seco-8(14)a-homo-5alpha-pregnан



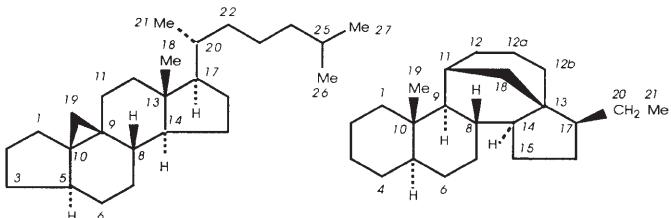
13(17)-alpha-Homo-12,18-dinor-5alpha-pregnан (2S,7alphaH,16alphaH)-7H-1,16:2,4-Dicyclo-3,4-secocorynan<sup>(#)</sup>

Schema 20. Anwendung der Regel RF-4.7.2. Anmerkung: Der Name bedeutet, dass der Ringerweiterung der Bindungsbruch folgt; ein Methyl-seco-Name könnte ebenfalls verwendet werden.

### RF-4.7.3 (Alternative zu RF-4.7.4)

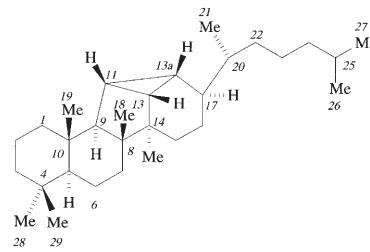
Nach dem Beachten von RF-4.7.1 und RF-4.7.2 werden stammsystemmodifizierende<sup>[\*\*]</sup> Präfixkombinationen in alphabetischer Reihenfolge von links nach rechts in Richtung auf den Namen der Grundstammverbindung genannt. Numerische Präfixe, die Mehrfachoperationen der gleichen Art bezeichnen, haben keinen Einfluss auf die Reihenfolge (Beispiele: Schema 21 und 22).

Anmerkung: Die Verbindung 11beta,18-Cyclo-12a,12b-dihomo-5alpha-pregnан (Schema 21) kann auf mindestens zwei weitere Arten benannt werden: 1. 11alpha,18b-Cyclo-18a,18b-dihomo-5alpha,13alpha-pregnан; 2. 11alpha,13Propano-18-nor-5alpha,13alpha-pregnан. Der erste Name nutzt die gleiche Zahl von Operationen, erweitert aber eine Seitenkette anstatt einen Ring zu vergrößern (letztgenannte Operation scheint gebräuchlicher zu sein), wodurch höhere Lokanten resultieren. Der zweite Name nutzt nur eine der in diesem Abschnitt behandelten Operationen, muss aber eine Brücke (siehe RF-6) verwenden, was man für besser halten kann oder nicht.<sup>[\*\*\*]</sup>



9,19-Cyclo-4-nor-5alpha,9beta-cholestane<sup>(#)</sup> 11beta,18-Cyclo-12a,12b-dihomo-5alpha-pregnан

### Schema 21. Anwendung der Regel RF-4.7.3.



11,13alpha-Cyclo-13(17)-alpha-homo-12-nordammaran<sup>(#)</sup>

### Schema 22. Weitere Anwendung der Regel RF-4.7.3.

#### RF-4.7.4 (Alternative zu RF-4.7.3)

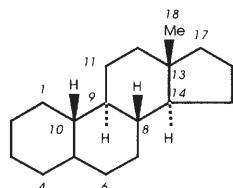
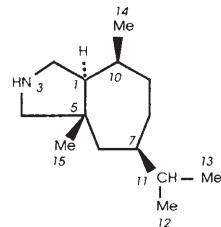
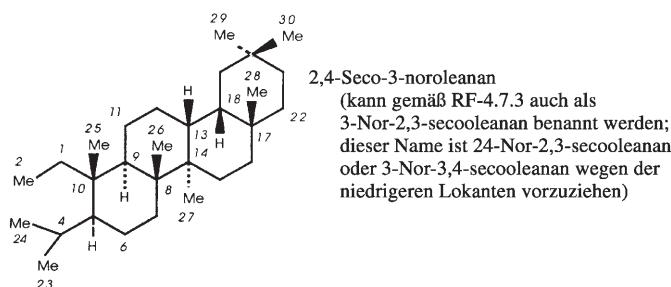
Nach dem Beachten von RF-4.7.1 und RF-4.7.2 werden zuerst Präfixe genannt, die Bindungsumlagerungen angeben (Cyclo-, Seco- usw.) und danach Präfixe, die für zusätzliche oder fehlende Gerüstatome stehen (Apo-, Homo-, Nor.).<sup>(#)</sup> Wird aus einer Gruppe mehr als eine Operation benötigt, werden diese in alphabetischer Reihenfolge vor dem Namen der Stammverbindung genannt (Beispiele: Schema 23 und 24).

Anmerkung: Das Cyclosecohomoestran in Schema 23 kann auch als (11betaH)-7(8 → 11)-Abeo-17a-homo-5alpha-estran<sup>(#)</sup> bezeichnet werden, wobei nur zwei Operationen benötigt werden.<sup>(#)</sup>

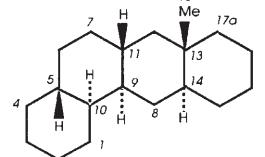
[\*] Der für die Verbindung in Schema 20 angedeutete Alternativname lautet 8alpha-Methyl-8,14-seco-5alpha-pregnан. Er ist wesentlich klarer, widerspricht jedoch Regel 35-6.3.<sup>[4]</sup>

[\*\*] Die ebenfalls zu den stammsystemmodifizierenden Präfixen gehörenden Austauschpräfixe für Gerüstatome (siehe Regel RF-5), Anellierungspräfixe (RF-6) und Präfixe für Brücken werden hier nicht berücksichtigt.

[\*\*\*] Diese Formulierung, nach der es dem Belieben des Nutzers überlassen ist, welchen Namen er wählt, ist keine Regel. Es wird empfohlen, der Regel RF-4.7.1 sinngemäß zu folgen, wonach die in den Abschnitten RF-4.1 bis RF-4.4 beschriebenen nichtabtrennbaren Präfixe bei gleicher Zahl von Operationen bevorzugt werden.

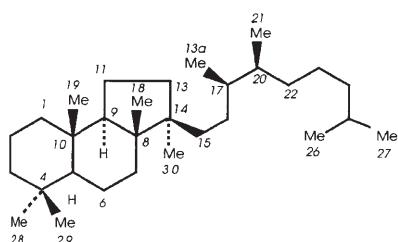


Estran  
(Grundstammverbindung)



7,11 $\alpha$ -Cyclo-7,8-seco-17a-homo-5 $\alpha$ -estran  
(7,11 $\alpha$ -Cyclo-17a-homo-7,8-seco-5 $\alpha$ -estran gemäß RF-4.7.3)

**Schema 23.** Anwendung der Regel RF-4.7.4.



(17R,20S)-13,13a-Seco-13(17)a-homo-12-nordammaran<sup>(#)</sup>

**Schema 24.** Weitere Anwendung der Regel RF-4.7.4.<sup>(#)</sup>

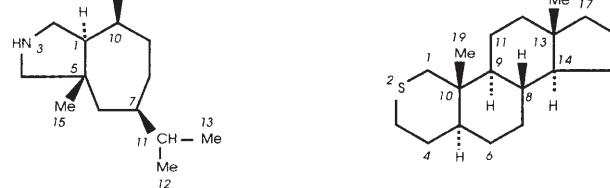
#### Regel RF-5 Austausch von Gerüstatomen<sup>(D)</sup>

Der Austausch von Gerüstatomen in Stammverbindungen, die nach RF-3 und RF-4 benannt wurden, wird angegeben, indem die Regeln der Austauschnomenklatur (siehe Regeln B-4,<sup>[2]</sup> C-0.6<sup>[2]</sup> und R-2.3.3.2<sup>[3](#)</sup>) und deren im Folgenden beschriebenen Erweiterungen angewendet werden.

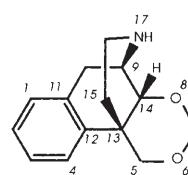
#### RF-5.1

Der Austausch eines Kohlenstoffatoms im Gerüst einer Stammverbindung gegen ein Heteroatom wird mit den entsprechenden a-Termen (Austauschpräfixen) bezeichnet (siehe R-9.3<sup>[3]</sup>).<sup>[\*]</sup> Dieses Verfahren wird auch angewendet, wenn die Stammverbindung bereits ein Heterocycle ist. Die Bezifferung der Stammverbindung bleibt erhalten (Beispiele: Schema 25).

[\*] Die a-Terme für Heteroatome werden in der Reihenfolge abnehmender Priorität der Heteroatome (siehe B-4.1<sup>[2]</sup> und R-9.3<sup>[3]</sup>) genannt. Die Rangfolge der wichtigsten Heteroatome ist O > S > N > P > As > Si > B.



3-Azaambrosan

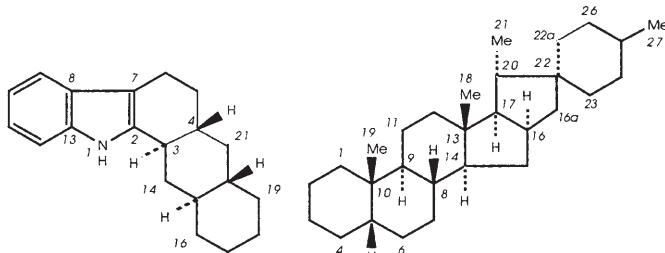


6,8-Dioxamorphinan

**Schema 25.** Anwendung der Regel RF-5.1.

#### RF-5.2

Der Austausch eines Heteroatoms in der Stammverbindung eines Naturstoffs durch ein Kohlenstoffatom wird mit dem Austauschpräfix Carba- beschrieben. Dabei bleibt die ursprüngliche Bezifferung erhalten. Hat das Heteroatom in der Stammverbindung keine Nummer, so wird das an seine Stelle tretende Kohlenstoffatom nummeriert, indem der Buchstabe a an die Nummer für das niedrigernummiererte direkten benachbarten Gerüstatom angehängt wird. Ist dieses ein „Homo“-Atom, so werden die Buchstaben b, c usw. verwendet. Die Konfiguration am neuen Gerüstatom wird nach den Methoden zur Bezeichnung der Konfiguration zusätzlicher Chiralitätszentren (siehe RF-10.2 und RF-6.2.4<sup>(D)</sup>) angegeben (Beispiele: Schema 26).



(4 $\beta$ H)-1H-4-Carbayohimban<sup>(#)</sup>      16a,22a-Dicarba-5 $\beta$ -spirostan

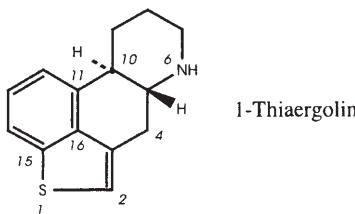
**Schema 26.** Anwendung der Regel RF-5.2.

#### RF-5.3

Der Austausch eines Heteroatoms in einer Stammverbindung durch ein anderes Heteroatom wird mit dem zugehörigen a-Term angegeben (Beispiel: Schema 27).

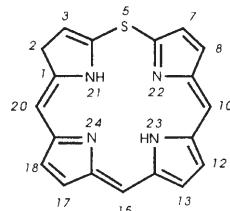
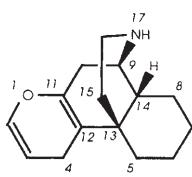
#### RF-5.4 Indizierter Wasserstoff

Führt der Austausch eines Gerüstatoms in einer Teilstruktur einer Grundstammverbindung, die die maximale



**Schema 27.** Anwendung der Regel RF-5.3.

Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen oder ein ausgedehntes System konjugierter Doppelbindungen enthält, zu einer gesättigten Gerüstposition, so wird diese Position mit indiziertem Wasserstoff bezeichnetet (Beispiele: Schema 28).



**Schema 28.** Anwendung der Regel RF-5.4. *Anmerkung:* Der Name Porphyrin impliziert zwei gesättigte Positionen, im Allgemeinen an den Atomen 21 und 23.

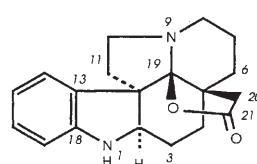
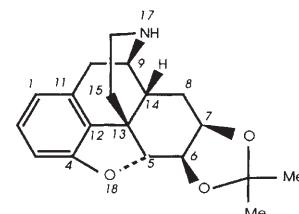
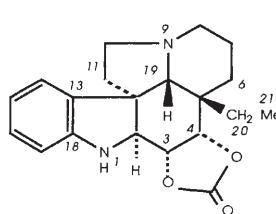
### Regel RF-6 Anellierung zusätzlicher Ringe

Sind zusätzliche Ringe oder Ringsysteme an das Grundgerüst eines Naturstoffs anelliert, ist es besonders hinsichtlich der Konfiguration oft vorteilhaft, einen halbsystematischen Naturstoffnamen beizubehalten.

Da die meisten cyclischen Naturstoffe vollständig gesättigte Grundstammverbindungen haben, während die Regeln der Anellierungsnomenklatur auf dem Vorliegen der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen beruhen, sind Adaptionen der allgemeinen Anellierungsnomenklatur notwendig, die in den folgenden Empfehlungen beschrieben werden. Dabei wurde nicht der Versuch unternommen, starre Vorschriften zu machen oder jeden Fall zu erfassen. Die Entscheidung zwischen einem Naturstoffanellierungsnamen und einem systematischen Anellierungsnamen hängt von den besonderen Umständen des jeweiligen Falls ab.

#### RF-6.1

An die Grundstammverbindung eines Naturstoffs anellierte Ringe oder Ringsysteme, die von funktionellen Gruppen abgeleitet sind, z.B. Lactone oder cyclische Acetale, sollten nach den üblichen Verfahren der organisch-chemischen Nomenklatur für derartige cyclische funktionelle Gruppen benannt werden (siehe auch RF-9.2<sup>(#)</sup> und RF-6.2.2) (Beispiele: Schema 29).



**Schema 29.** Anwendung der Regel RF-6.1.

#### RF-6.2

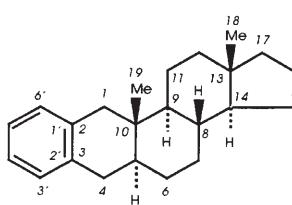
Die Grundstammverbindung eines Naturstoffs wird als Komponente in ihrem normalen Sättigungsgrad verwendet. Eine Doppelbindung wird demnach im Naturstoffstamm an der Anellierungsstelle nicht genannt, nur weil die andere Komponente die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthält. Die Bindungsverhältnisse an einer Anellierungsstelle werden daher im Allgemeinen von der Nicht-naturstoffkomponente bestimmt. Eine Anellierung, die zu einem quartären Kohlenstoffatom an der Anellierungstelle führt, wirkt sich auch auf die Bindungsverhältnisse aus (siehe RF-6.2.2<sup>(D)</sup> und RF-6.2.3).

#### RF-6.2.1

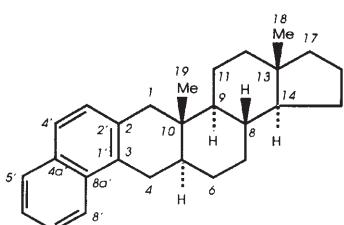
Ein an eine Grundstammverbindung anellierter Ring oder ein anelliertes Ringsystem (carbocyclisch oder heterocyclisch) mit systematischem Namen<sup>[2,3,7]</sup> wird durch sein Anellierungspräfix (siehe A-21.4, B-3,<sup>[2][\*]</sup> R-2.4.1.1<sup>[3]</sup> sowie FR-2.1 und FR-2.2<sup>[7](#)</sup>) vor dem Namen der Grundstammverbindung angegeben. Die Anellierungsstelle wird durch – nötigenfalls durch Doppelpunkt getrennte – Lokantensätze bezeichnet, die in eckigen Klammern zwischen den Namenskomponenten stehen. Die Gerüstatome des Naturstoffs werden durch einfache (ungestrichene) Lokanten, die der systematisch benannten Komponente durch gestrichene Lokanten gekennzeichnet. Besteht eine Wahlmöglichkeit, so sollten die Lokanten für die systematisch benannte Komponente möglichst niedrig sein und in der gleichen Zählrichtung genannt werden wie die der Naturstoffkomponente. Endständige Vokale in den Namen systematisch benannter Komponenten werden nicht weggelassen, auch wenn auf sie ein Vokal folgt (dies ist in Einklang mit den Empfehlungen

[\*] Diese Regeln sind durch die nachfolgend zitierten Regeln R-2.4.1<sup>[3]</sup> sowie FR-2.1 und FR-2.2<sup>[7]</sup> ergänzt bzw. ersetzt.

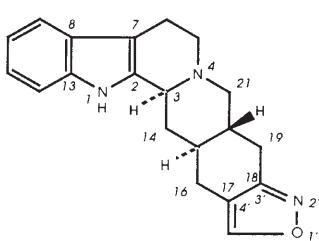
zur Nomenklatur anellierter Ringsysteme<sup>[7][\*]</sup> und eine Änderung gegenüber früheren Empfehlungen<sup>[2](#)</sup>) (Beispiele: Schema 30).



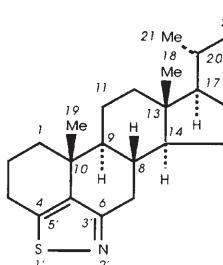
Benzo[2,3]-5α-androstan



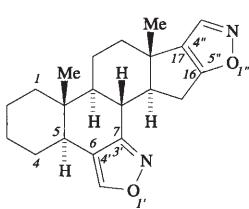
Naphtho[2',1':2,3]-5α-androstan



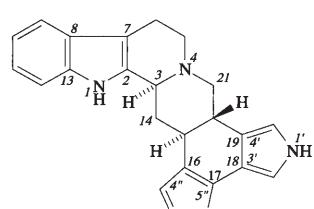
1H-[1,2]Oxazolo[4',3':17,18]yohimban(#)



[1,2]Thiazolo[5',4',3':4,5,6]cholestan(#)



Bis[1,2]oxazolo[4',3':6,7',4":16,17]-5α-androstan(#)



1'H-Pyrrolo[3',4':18,19][1,2]thiazolo[4",5":16,17]yohimban(#)

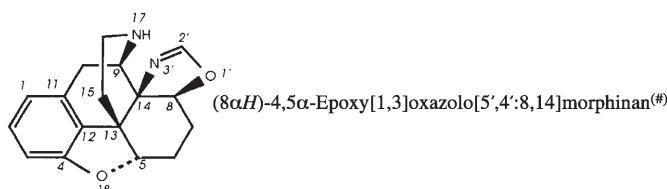
**Schema 30.** Anwendung der Regel RF-6.2.1. *Anmerkung:* Man beachte, dass bei der Benennung des Benzoandrostans nur ein Lokantsatz, nämlich der der Androstankomponente benötigt wird; der CAS-Indexname der Verbindung ist (5α)-benz[2,3]androst-2-ene.

[\*] Siehe Regel FR-4.7. Diese Änderung wurde bereits mit den Regeln R-0.1.7.2 und R-2.4.1.1<sup>[3]</sup> eingeführt.

Sind zwei oder mehr identische systematisch benannte Komponenten an das Gerüst eines Naturstoffs anelliert, erhält die Komponente, die mit den niedrigernummierierten Positionen des Naturstoffs verknüpft ist, Striche, die nächste Komponente zwei Striche usw. (Beispiel: das Bisoxazoloandrostan in Schema 30). Bei zwei oder mehr unterschiedlichen systematisch benannten Komponenten werden diese in alphabetischer Reihenfolge im Namen aufgeführt, und Striche werden in derselben Reihenfolge zugeordnet (Beispiel: das Pyrrolothiazoloyohimban in Schema 30).<sup>(#)</sup>

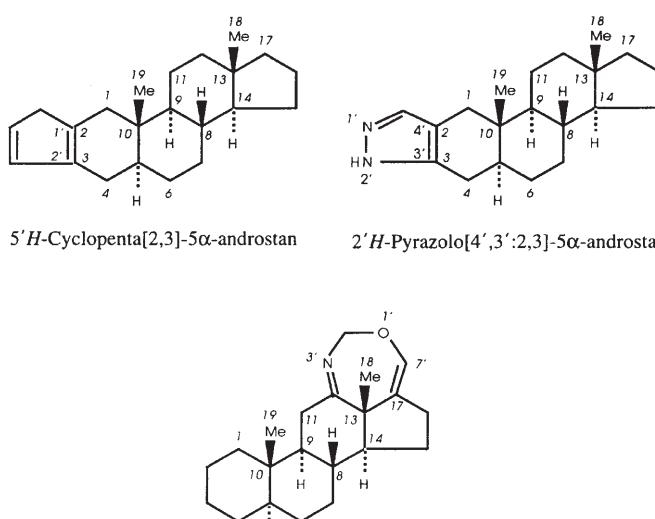
#### RF-6.2.2

Die an die Grundstammverbindung eines Naturstoffs anellierte systematisch benannte Komponente enthält die mit den Bindungserfordernissen an der Anellierungsstelle vereinbare maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen. Falls es notwendig ist, in der systematisch benannten Komponente (einschließlich der Anellierungsstellen) gesättigte Positionen anzugeben, an denen mindestens ein Wasserstoffatom vorhanden ist, werden diese mit indiziertem Wasserstoff gekennzeichnet (siehe A-21.6<sup>[2]</sup> und R-1.3<sup>[3]</sup>) (Beispiel: Schema 31). Besteht eine Wahlmöglichkeit, so wird die



**Schema 31.** Anwendung der Regel RF-6.2.2.

Position des indizierten Wasserstoffs durch ungestrichene Lokanten angegeben (Beispiele: Schema 32).<sup>(#)</sup> Zur Konfiguration von Chiralitätszentren, die durch die Anellierung entstehen, siehe RF-6.2.4.<sup>(#)</sup>

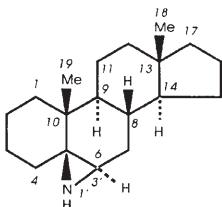


2'H-[1,3]Oxazepino[4',5':12,13,17]-5α-androstan

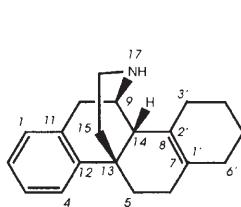
**Schema 32.** Weitere Anwendung der Regel RF-6.2.2.

## RF-6.2.3

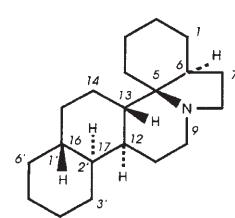
Gesättigte oder partiell gesättigte carbocyclische und heterocyclische Ringkomponenten, die an die Grundstammverbindung eines Naturstoffs anelliert sind, werden mit Hydropräfixen benannt. Besteht eine Wahlmöglichkeit, so werden ungestrichene Lokanten verwendet<sup>(#)</sup> (Beispiele: Schema 33).



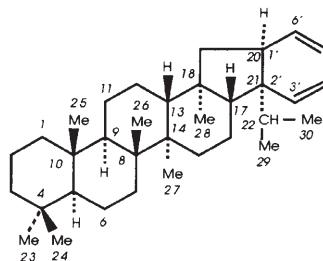
(6 $\alpha$ H)-1',6-Dihydroazirino[2',3':5,6]-5 $\beta$ -androstan<sup>(#)</sup>



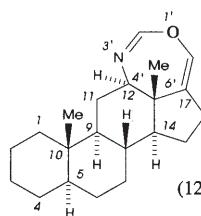
3',4',5',6'-Tetrahydrobenzo[7,8]morphinan



(12 $\alpha$ H,13 $\beta$ H,16 $\beta$ H,17 $\alpha$ H)-3',4',5',6',12,13,14,15,16,17-Decahydrobenzo[16,17]erythrinan<sup>(#)</sup>



(20 $\alpha$ H,21R)-20H-Benzо[20,21]-17(22→21)-abeogammaceran<sup>(#)</sup>  
(wurde früher auch 1 $H$ -Benzо[20,21]-A-neogammaceran genannt)



(12 $\alpha$ H)-12H-[1,3]Oxazepino[4',5',6':12,13,17]-5 $\alpha$ -androstan<sup>(#)</sup>

## Schema 33. Anwendung der Regel RF-6.2.3.

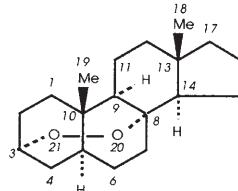
## RF-6.2.4<sup>(#)</sup>

Die Konfiguration von Chiralitätszentren, die durch die Anellierung oder durch Hydrierung entstehen, wird durch die Symbole  $\alpha/\beta$  in Übereinstimmung mit ihrer Verwendung in den Empfehlungen zur Benennung von Steroiden (siehe 3S-1.4, 3S-10.2<sup>[4]</sup> und RF-10) oder, falls erforderlich, nach dem Sequenzregelverfahren (*R/S*) (siehe auch RF-10) angegeben. Die Ausrichtung des Wasserstoffatoms unterhalb ( $\alpha$ ) oder oberhalb ( $\beta$ ) der Bezugsebene des Ringsystems wird mit dem Lokanten, dem entsprechenden Symbol und einem kursiv gesetzten *H* angegeben, die zusammen in Klammern eingeschlossen werden<sup>[\*]</sup> (Beispiele sind in Schema 31, 33 und 34 zu finden). Dabei ist zu beachten, dass ein solcher Stereodeskriptor kein Ersatz für indizierten Wasserstoff ist (Beispiele: Schema 34).<sup>(#)</sup>

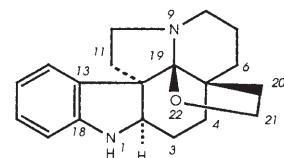
## Regel RF-7 Verbrückte Grundstammverbindungen

Atombrücken, die in Grundstammverbindungen von Naturstoffen eingeführt wurden, können mit den Methoden der systematischen organisch-chemischen Nomenklatur beschrieben werden (A-34,<sup>[2]</sup> B-15.1<sup>[2]</sup> und R-9.2<sup>[3]</sup>). Dieses Verfahren wird häufig bei Heteroatombrücken angewendet. Tatsächlich ist diese Methode oft zweckmäßiger als das Anellierungsverfahren, um bestimmte an eine Grundstammverbindung anellierte Heterocyclen zu beschreiben, z.B. Oxireno- (Epoxy-) und Thiireno- (Epithio-). Brückenpräfixe sind nichtabtrennbare Präfixe (Beispiele: Schema 35 und 36<sup>[\*\*]</sup>).

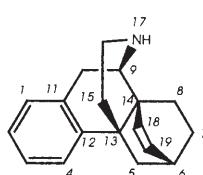
## Schema 34. Anwendung der Regel RF-6.2.4.



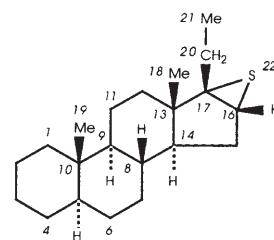
3 $\alpha$ ,8-Epidioxy-5 $\alpha$ ,8 $\alpha$ -androstan



19,21-Epoxyaspidospermidin

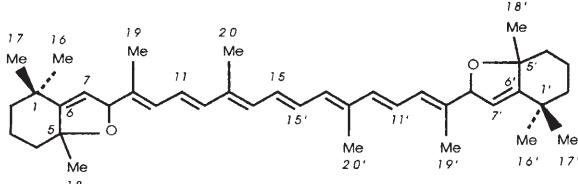


6 $\beta$ ,14-Ethenomorphinan  
(Alternativname:  
6 $\alpha$ ,14-Ethano-14 $\alpha$ -morphin-7-en)



16 $\alpha$ ,17-Epithio-5 $\alpha$ -pregnan  
[Alternativname nach RF-6:  
(16 $\beta$ H)-Thiireno[16,17]-5 $\alpha$ -pregnan<sup>(#)</sup>]

## Schema 35. Anwendung der Regel RF-7.



5,8:5',8'-Diepoxy-5,8,5',8'-tetrahydro-β,β-carotin

**Schema 36.** Weitere Anwendung der Regel RF-7. **Anmerkung:** Hier wurde der Name gemäß den Empfehlungen für Carotinoide<sup>[5]</sup> gebildet, in denen das Brückenpräfix Epoxy- abtrennbar ist und für Hydropräfixe ungestrichene Lokanten vor den gestrichenen aufgeführt werden.<sup>(#)</sup>

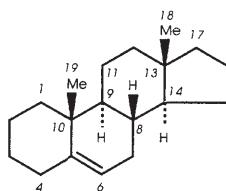
[\*] Ein solcher Stereodeskriptor steht am Anfang des Namens der gesamten Verbindung und wird mit eventuellen weiteren Stereodeskriptoren gemeinsam in runde Klammern eingeschlossen.

[\*\*] Es ist nicht einleuchtend, warum bei der Benennung von Carotinoiden eine allgemeine Regel nicht gelten sollte. Würde der Name des Carotins in Schema 36 gemäß den Regeln RF-7 und R-0.2.4.2 gebildet, lautete er 5,5',8,8'-Tetrahydro-5,8:5',8'-diepoxy-β,β-carotin.

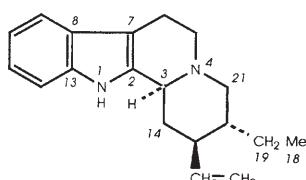
### Regel RF-8 Änderung der Bindungsordnung

#### RF-8.1

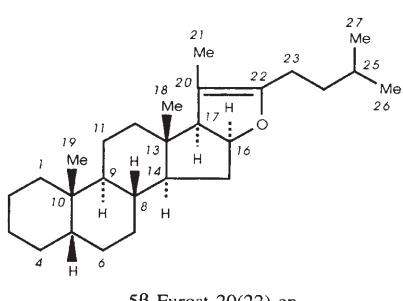
Unsättigung in einer Verbindung, deren Stammverbindung (siehe RF-3 bis RF-7) vollständig gesättigt ist, oder in dem Teil einer Stammverbindung, der sonst vollständig gesättigt ist, wird gekennzeichnet, indem -an in -en, -adien, -in usw., -anin in -enin, -adienin, -inin usw. oder -an- in -en-, -adien-, -in- usw. umgewandelt werden (siehe 3S-2.5 in der Steroidnomenklatur<sup>[4]</sup> und Regel R-3.1.1<sup>[3]</sup>).<sup>(#)</sup> Lokanten (Nummern und/oder Buchstaben) werden direkt vor den Teil des Namens gestellt, auf den sie sich beziehen (siehe R-0.1.2<sup>[3]</sup>) (Beispiele: Schema 37 und 38).



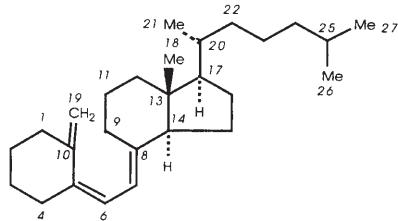
Androst-5-en



Coryn-16-en

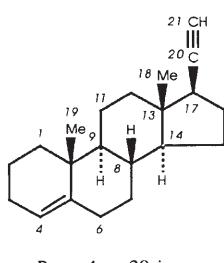


5 $\beta$ -Furost-20(22)-en

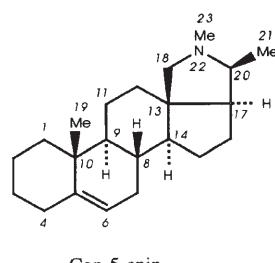


(5 $Z$ ,7 $E$ )-9,10-Secocholeta-5,7,10(19)-trien

**Schema 37.** Anwendung der Regel RF-8.1.



Pregn-4-en-20-in

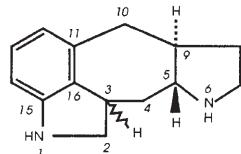


Con-5-enin

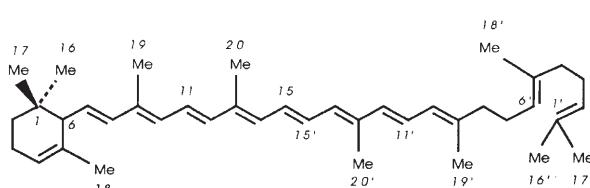
**Schema 38.** Weitere Anwendung der Regel RF-8.1.

#### RF-8.2

Die Sättigung von Doppelbindungen in einer Stammverbindung (siehe RF-3 bis RF-7), deren Name das Vorliegen von isolierten Doppelbindungen und/oder einem System konjugierter Doppelbindungen impliziert, wird mit dem Präfix Hydro- und dem diesem vorangestellten passenden numerischen Präfix<sup>[\*]</sup> bezeichnet (Beispiele: Schema 39<sup>[\*\*]</sup>).



(3 $\xi$ ,9 $\alpha$ H)-2,3-Dihydro-5(10 $\rightarrow$ 9)-abeoergolin<sup>(#)</sup>

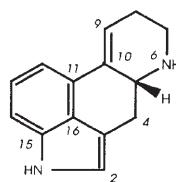


7',8'-Dihydro- $\alpha$ , $\psi$ -carotin

**Schema 39.** Anwendung der Regel RF-8.2.

#### RF-8.3

Unsättigung in einer Verbindung, deren Stammname nicht auf -an oder -anin endet und bei der die Unsättigung über die durch den Stammnamen implizierte (siehe RF-3 bis RF-7) hinausgeht, die Umwandlung einer implizierten Doppelbindung in eine Dreifachbindung und die Einführung einer zusätzlichen Doppelbindung unter Umlagerung einer implizierten Doppelbindung werden mit dem Präfix Dehydro- angegeben, dem ein numerisches Präfix entsprechend der Zahl der fehlenden Wasserstoffatome mit den zugehörigen Lokanten vorangestellt wird (Beispiele: Schema 40 und 41).



9,10-Didehydroergolin

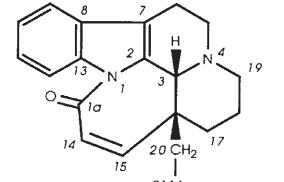
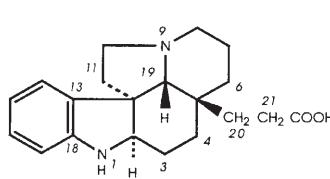
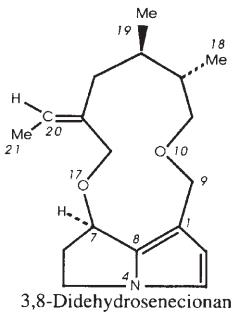
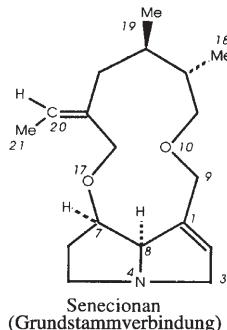
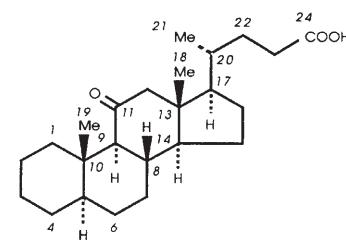
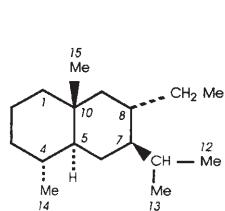
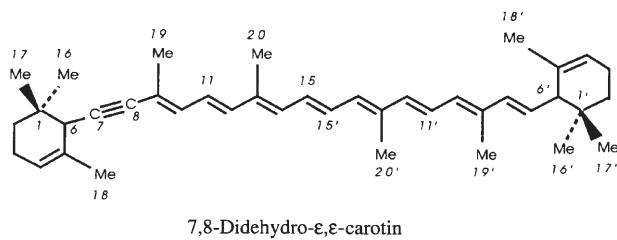
**Schema 40.** Anwendung der Regel RF-8.3.

#### RF-8.4

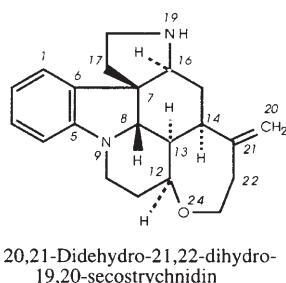
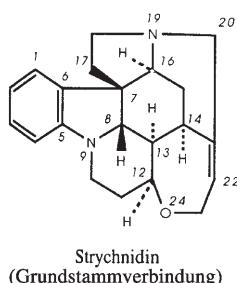
Die Umlagerung einer Doppelbindung kann durch eine Kombination aus Hydro- und Dehydropräfixen angegeben werden (Beispiel: Schema 42).

[\*] Vor einem Hydropräfix können nur geradzahlige numerische Präfixe stehen (siehe Regel R-3.1.2<sup>[3]</sup>).

[\*\*] Wenn die Konfiguration in Position 3 des Dihydroabeoergolins bekannt wäre, lautete der betreffende Stereodeskriptor 3 $\alpha$ H oder 3 $\beta$ H.



**Schema 41.** Weitere Anwendung der Regel RF-8.3.



**Schema 42.** Anwendung der Regel RF-8.4.

### Regel RF-9 Derivate von Stammverbindungen<sup>(D)</sup>

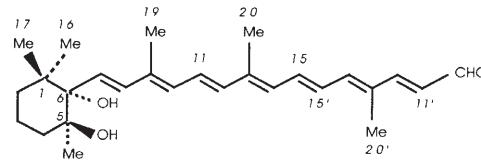
Derivate von Stammverbindungen werden möglichst nach den üblichen Methoden der systematischen Nomenklatur<sup>[2,3]</sup> benannt.

#### RF-9.1

Die Präfixe und Suffixe der organisch-chemischen Nomenklatur<sup>[2,3](D)</sup> werden verwendet, um Atome und Gruppen zu benennen, die Wasserstoffatome in den Stammverbindungen substituieren. Für die Benennung von abgeleiteten Säuren und verwandten charakteristischen Gruppen werden, soweit möglich, die unveränderten Stammverbindungen verwendet (Beispiele: Schema 43).

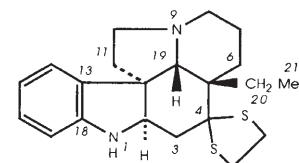
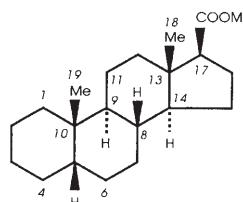
#### RF-9.2

Änderungen von charakteristischen Hauptgruppen – Ester, Acetale usw. – werden nach den üblichen Methoden der organisch-chemischen Nomenklatur benannt.<sup>[2,3](D)</sup> Cyclische Modifizierungen – Lactone, cyclische Acetale usw. –



**Schema 43.** Anwendung der Regel RF-9.1.

werden vorzugsweise als solche bezeichnet und nicht als anellierte Ringe, verbrückte oder spiro-modifizierte Stammverbindungen (siehe auch RF-6.1) (Beispiele: Schema 44).



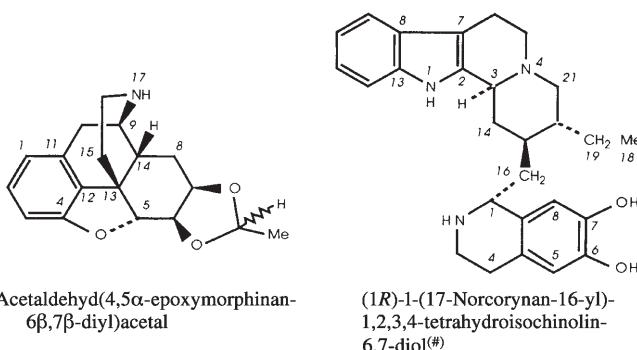
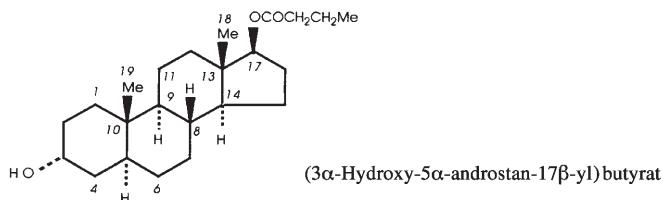
**Schema 44.** Anwendung der Regel RF-9.2.

#### RF-9.3

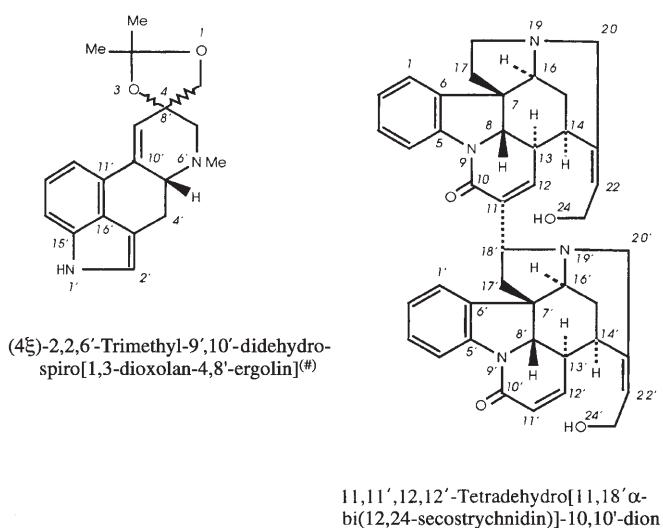
Wird der Name einer Naturstoffstammverbindung als Präfix benötigt, kann er wie üblich gebildet werden, indem er ein Suffix wie -yl, -diyl oder -yliden erhält (Beispiele: Schema 45).

#### RF-9.4

Ringverbände und Spiroderivate von Stammverbindungen werden in der üblichen Weise<sup>[2,3]</sup> benannt (Beispiele: Schema 46).



**Schema 45.** Anwendung der Regel RF-9.3. Anmerkung: Da es keine festgelegte Orientierung für Isochinolin gibt, muss beim letzten Beispiel die Konfiguration mithilfe des R/S-Systems angegeben werden. (##)



**Schema 46.** Anwendung der Regel RF-9.4.

Anmerkung: Im Namen des Ringverbands im zweiten Beispiel<sup>[\*]</sup> von Schema 46 folgt die Hydroxygruppe aus der Seco-Operation. Um die Hydroxygruppe als Substituenten explizit nennen zu können, müsste das Sauerstoffatom durch eine Nor-Operation entfernt werden; daran würden sich eine Seco-Operation und das Anfügen des Präfixes Hydroxy anschließen.<sup>[\*\*]</sup>

[\*] In diesem Namen wurden gemäß Regel R-2.4.4.1<sup>[3]</sup> die Klammern um (12,24-secostrychnidin) eingefügt.

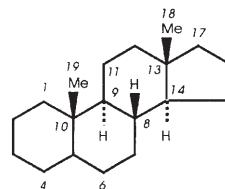
[\*\*] Der hier angedeutete Name lautet 23,23'-Dihydroxy-11,11',12,12'-tetra dehydro[11,18'α-bi(12,23-seco-24-norstrychnidin)]-10,10'-dion. Da hierfür zwei zusätzliche Operationen benötigt werden, widerspricht dieser Name jedoch Regel RF-4.7.1.

### Regel RF-10 Konfigurationsbeschreibung

#### RF-10.1

Die Namen von Grundstammverbindungen und modifizierten Stammverbindungen (siehe RF-3 bis RF-7) implizieren ohne weitere Spezifizierung an allen stereogenen Einheiten die absolute Konfiguration, wie sie in diesen Empfehlungen und im folgenden Anhang wiedergegeben ist.

Wird ein planares oder quasiplanares Ringsystem wie in diesen Empfehlungen als Projektion in die Papierebene gezeichnet, so werden an einen Ring gebundene Atome oder Gruppen mit  $\alpha$  bezeichnet, wenn sie unterhalb der Papierebene liegen, und mit  $\beta$ , wenn sie oberhalb der Papierebene liegen. Die Verwendung dieses Systems erfordert die hier verwendete Orientierung der Verbindungen.<sup>[\*]</sup> Bei dem in Schema 47 gezeigten Androstan sind damit folgende Konfi-



**Schema 47.** Anwendung der Regel RF-10.1.

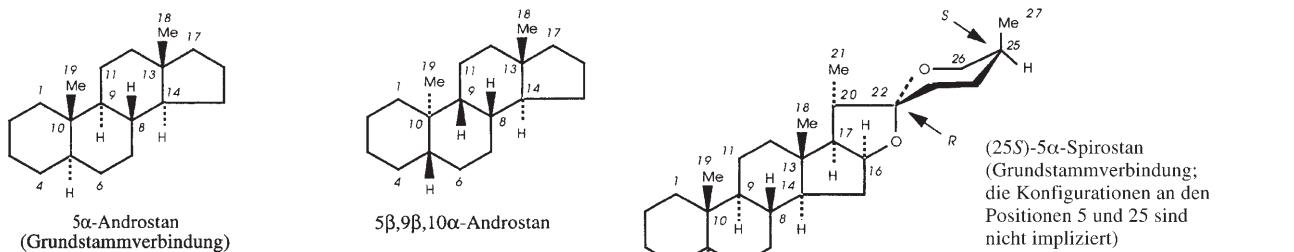
gurationen impliziert: für die Wasserstoffatome und Methylgruppen an den Positionen 8, 10 und 13 die  $\beta$ -Orientierung und für die an den Positionen 9 und 14 die  $\alpha$ -Orientierung; die unbestimmte Orientierung des Wasserstoffatoms am Chiralitätszentrum in Position 5 wird mit dem Deskriptor  $\xi$  beschrieben. Liegt ein Racemat vor, so sollte dasjenige Enantiomer gezeichnet werden, bei dem das Chiralitätszentrum mit dem niedrigsten Lokanten die  $\alpha$ -Konfiguration hat (siehe auch RF-10.5<sup>(#)</sup>). Dieses Vorgehen kann von der üblichen Praxis abweichen, das Enantiomer mit der gleichen absoluten Konfiguration wie die natürlich vorkommende Substanz zu zeichnen.

#### RF-10.2 Konfigurationen, die sich von denen der Stammverbindung unterscheiden, oder an durch Substitution usw. entstandenen Chiralitätszentren

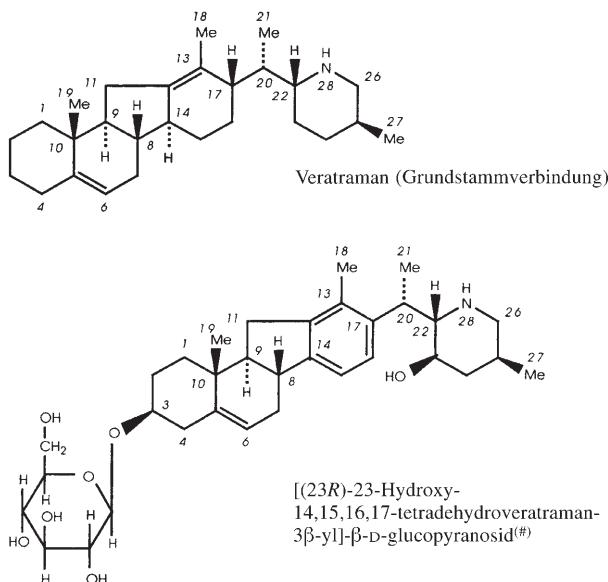
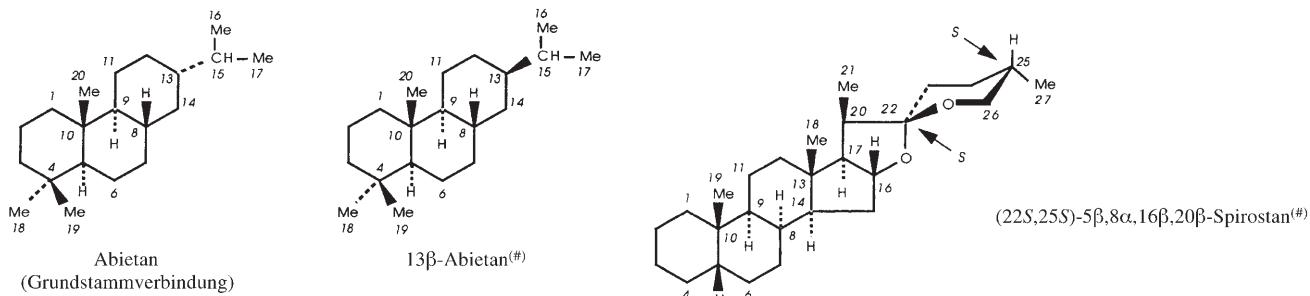
#### RF-10.2.1

An Chiralitätszentren wird das  $\alpha/\beta$ -System, wie oben oder in Regel 3S-1.4 von Lit. [4] und Regel E-4.11 von Lit. [2] beschrieben, verwendet (siehe auch Abschnitt 2 der Empfehlungen zur Nomenklatur von Vitamin D<sup>[6]</sup>) (Beispiele: Schema 48 und 49). Die Änderung der Konfiguration eines Chiralitätszentrums, das sich nicht an einem Brückenkopf

[\*] Es ist zwar empfohlen, aber nicht zwingend vorgeschrieben, die Formeln stets in der angegebenen Orientierung zu zeichnen. Die Stereodeskriptoren  $\alpha$  und  $\beta$  beziehen sich jedoch auf diese Standard-Orientierung, auch wenn die Formeln in einer anderen Orientierung gezeichnet sind (vgl. Regel 3S-1.4<sup>[4]</sup>).



**Schema 48.** Anwendung der Regel RF-10.2.1.



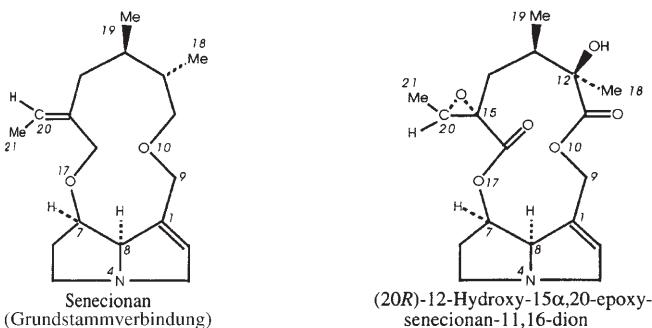
**Schema 49.** Weitere Anwendung der Regel RF-10.2.1.

befindet und eine zur Stammverbindung gehörende Seitenkette trägt, wird wie für Position 17 von Steroiden beschrieben (Regel 3S-5.2<sup>[4]</sup>) angegeben. Die Deskriptoren  $\alpha$  und  $\beta$  bezeichnen dann die Orientierung der Seitenkette und nicht die des Wasserstoffatoms in derselben Position (siehe erstes Beispiel in Schema 49<sup>(D)</sup>).<sup>(#)</sup>

### RF-10.2.2

Ist die  $\alpha/\beta$ -Methode nicht anwendbar oder für eine bestimmte Naturstoffklasse nicht akzeptabel, so wird die R/S-Bezeichnung gemäß dem Sequenzregelverfahren verwendet (Beispiele: Schema 49<sup>(D)</sup>, 50 und 51).

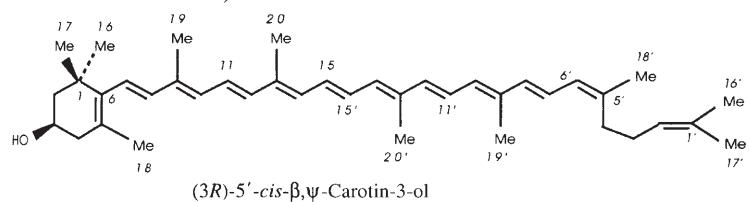
**Schema 50.** Anwendung der Regel RF-10.2.2.



**Schema 51.** Weitere Anwendung der Regel RF-10.2.2.

### RF-10.2.3

Die Deskriptoren *cis/trans*<sup>[\*]</sup> oder *E/Z* werden verwendet, um eine geänderte Konfiguration oder die Konfiguration zusätzlicher Doppelbindungen anzugeben (Beispiel: Schema 52).

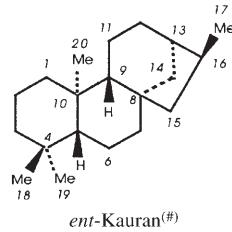
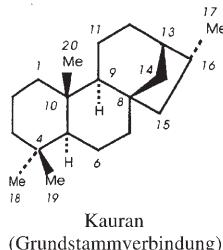


**Schema 52.** Anwendung der Regel RF-10.2.3. *Anmerkung:* Namen von Carotinoiden setzen für alle Doppelbindungen *trans*-Konfiguration voraus; die *E/Z*-Methode wird auf Doppelbindungen von Carotinoiden im Allgemeinen nicht angewendet.

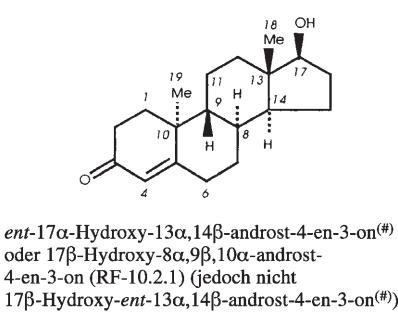
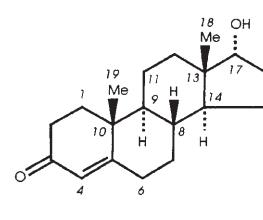
[\*] Die Deskriptoren *cis* und *trans* werden für Doppelbindungen nur bei Carotinoiden empfohlen. Es ist allerdings nicht einleuchtend, warum die allgemeine Regel, dass die Konfiguration von Doppelbindungen mit den Deskriptoren *E* und *Z* angegeben wird, für diesen Teilbereich der Chemie nicht gelten sollte.

### RF-10.3

Die Konfigurationsumkehr an allen Chiralitätszentren<sup>[\*]</sup> wird mit dem kursiv gesetzten Präfix *ent*- (verkürzte Form von *enantio*-) vor dem vollständigen Namen der Verbindung gekennzeichnet. Dieses Präfix bezeichnet die Inversion aller Chiralitätszentren (einschließlich der durch zusätzlich eingebrachte Substituenten entstandenen), unabhängig davon, ob deren Konfiguration im Namen angegeben oder impliziert ist<sup>(#)</sup> (Beispiele: Schema 53 und 54).



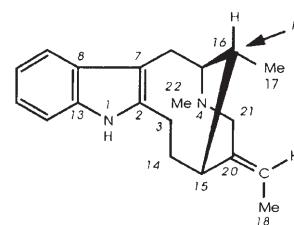
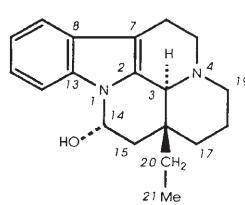
**Schema 53.** Anwendung der Regel RF-10.3. Anmerkung: Die Benennung dieser Verbindung variiert: Einige Autoren (und der *Chemical Abstracts Service*) verwenden den Namen Kauran für das als *ent*-Kauran bezeichnete Enantiomer.



**Schema 54.** Weitere Anwendung der Regel RF-10.3.

### RF-10.4

Die Konfigurationsumkehr an einem Chiralitätszentrum, dessen Konfiguration im Namen der Grundstammverbindung impliziert oder genannt ist,<sup>[\*\*]</sup> kann mit dem kursiv gesetzten Präfix *epi*- (abgeleitet von Epimer) und dem ihm vorangestellten Lokanten für das betroffene Atom vor dem Namen der Stammverbindung gekennzeichnet werden (Beispiele: Schema 55<sup>[\*\*\*]</sup>).



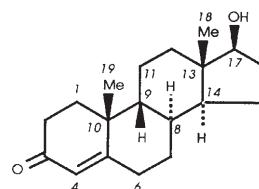
**Schema 55.** Anwendung der Regel RF-10.4. Anmerkung: Der Name Eburnamenin impliziert die 3 $\beta$ -Konfiguration, der Name Vobasan die 16S-Konfiguration.

### RF-10.5

Racemate werden mit dem kursiv gesetzten Präfix *rac*- (Abkürzung von *racemo*-) bezeichnet, das vor dem gesamten Verbindungsnamen einschließlich des eventuell vorhandenen Präfixes *epi*-<sup>(#)</sup> steht. Das Enantiomer für die Benennung wird entsprechend Regel RF-10.1 gewählt.<sup>[\*]</sup>

### RF-10.6

Für Chiralitätszentren, von denen die relative, aber nicht die absolute Konfiguration bekannt ist, werden in Übereinstimmung mit Regel E-4.10<sup>[2]</sup> die Symbole *R\** und/oder *S\** verwendet. Alternativ können Enantiomere, deren relative, nicht aber absolute Konfiguration bekannt ist, durch ein Präfix (+)-*rel*- oder (-)-*rel*- unterschieden werden, wobei sich das Plus- und das Minuszeichen auf die Drehrichtung von polarisiertem Licht der Natrium-D-Linie beziehen. Demnach wäre die rechtsdrehende Form der in Schema 56 gezeigten Verbindung als (+)-*rel*-17 $\beta$ -Hydroxy-8 $\alpha$ ,9 $\beta$ -androst-4-en-3-on zu bezeichnen.



**Schema 56.** Formel von 17 $\beta$ -Hydroxy-8 $\alpha$ ,9 $\beta$ -androst-4-en-3-one.

[\*] Das Präfix *ent*- bezeichnet die Umkehr der absoluten Konfiguration auch von anderen stereogenen Einheiten, soweit vorhanden, wie Chiralitätsachsen und Chiralitätsebenen.

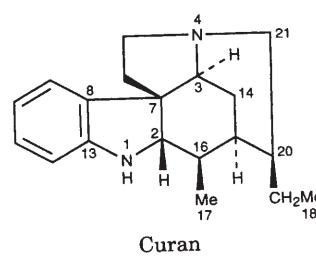
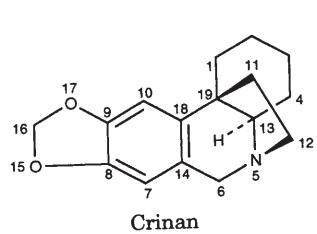
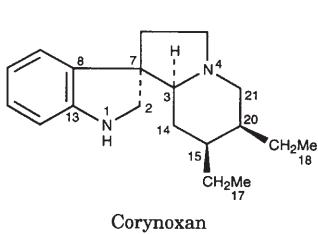
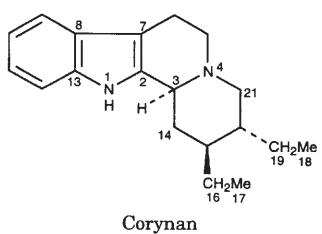
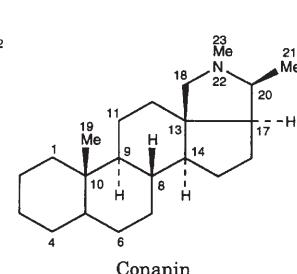
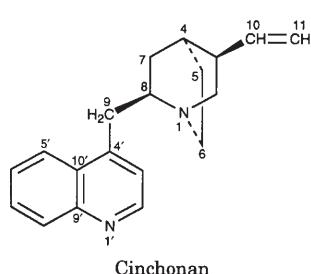
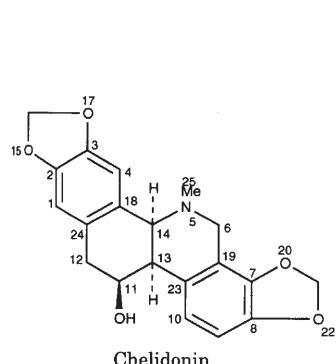
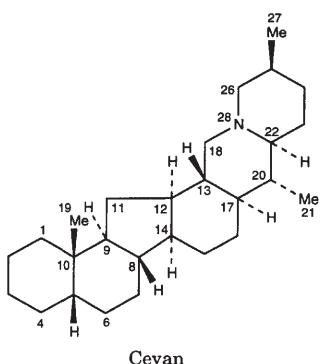
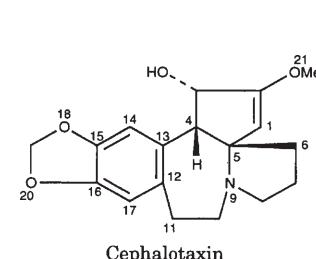
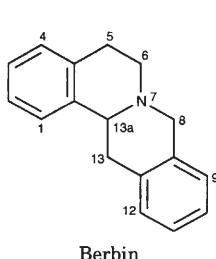
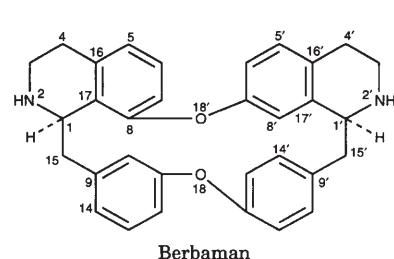
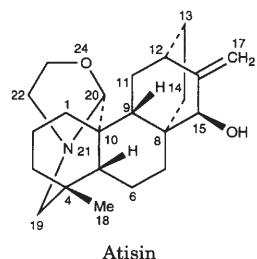
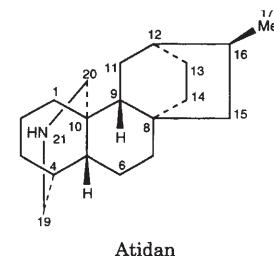
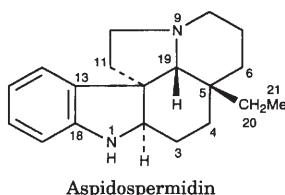
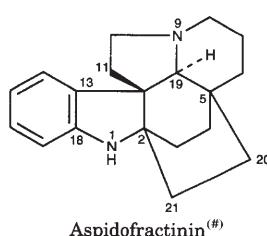
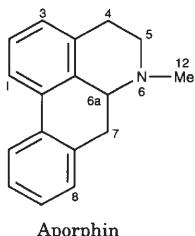
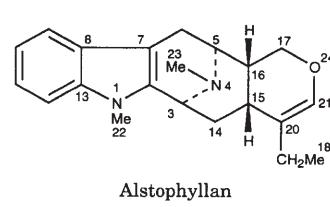
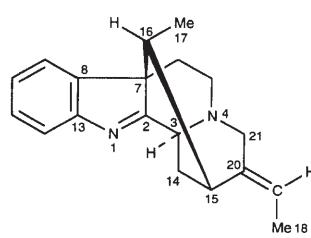
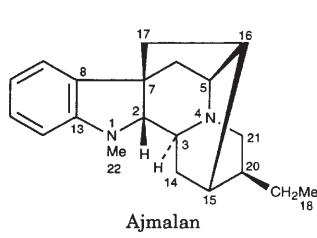
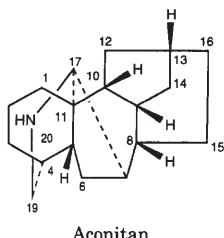
[\*\*] Das Präfix *epi*- sollte nur verwendet werden, wenn die Konfiguration im Stammnamen impliziert ist. Wenn die Konfiguration im Stammnamen nicht impliziert ist, ist es überflüssig, weil dann Regel RF-10.2 gilt.

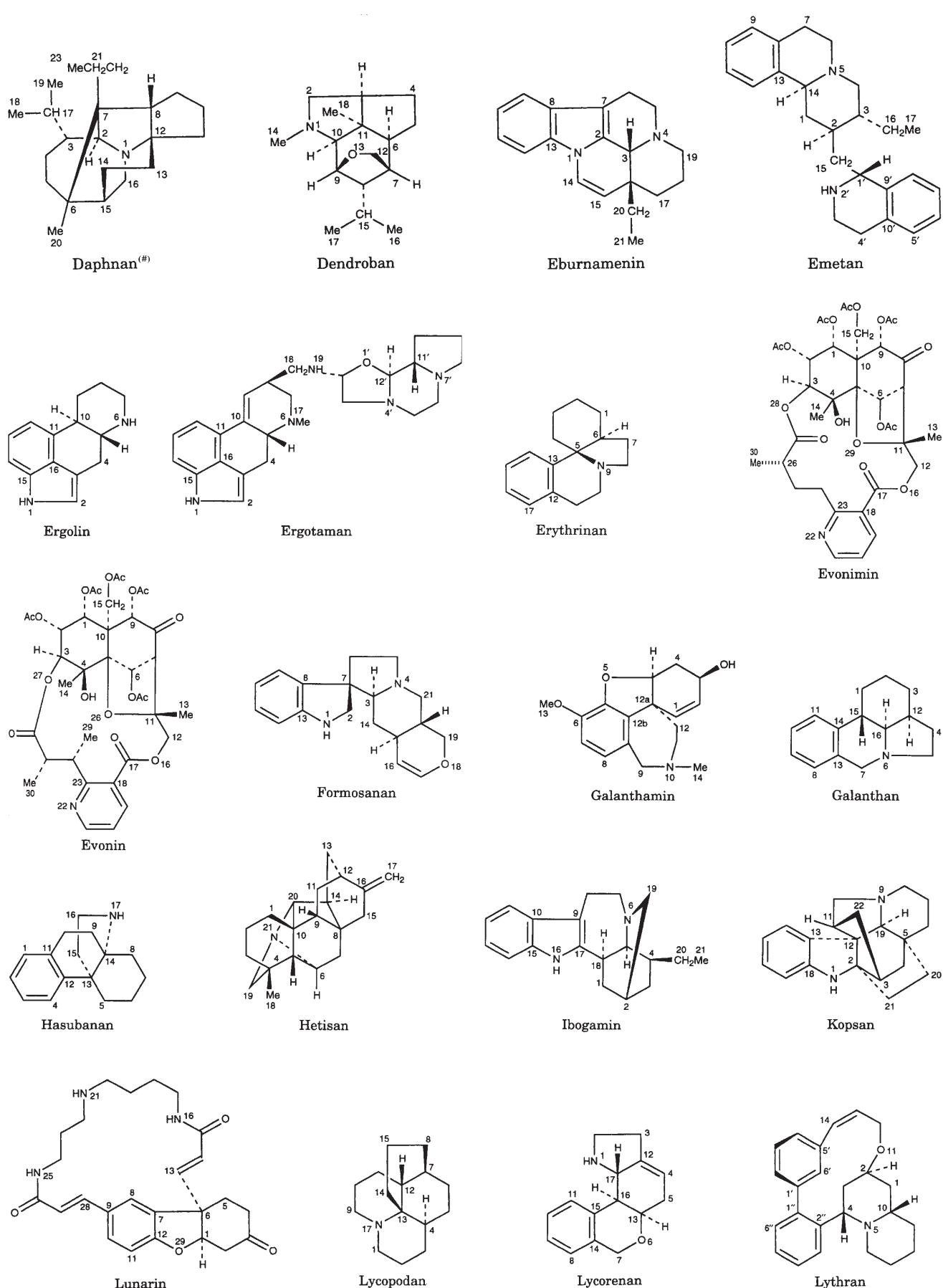
[\*\*\*] Der Name im ersten Beispiel von Schema 55 wurde gegenüber der englischen Ausgabe korrigiert.

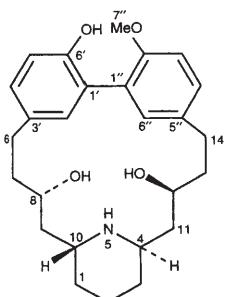
[\*] Diese Regel ist nicht durchdacht. Es ist unlogisch, erst das Enantiomer von beispielsweise 5 $\beta$ -Cholestan (*ent*-5 $\beta$ -Cholestan) zu benennen, um dann das Präfix *rac*- vor dessen Namen zu setzen. Es wird empfohlen, das Präfix *rac*- nicht mit dem Präfix *ent*- zu kombinieren.

## Anhang

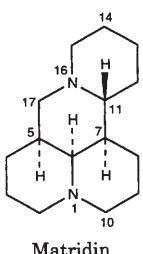
### Alkaloide



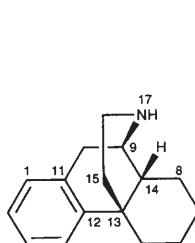




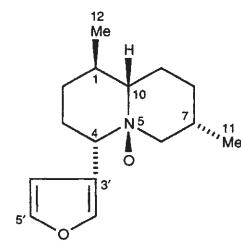
Lythranidin



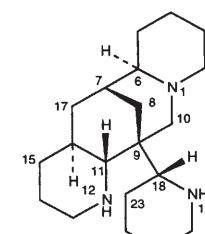
Matridin



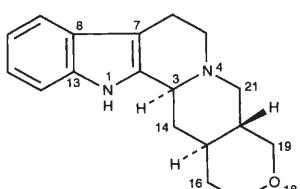
Morphinan



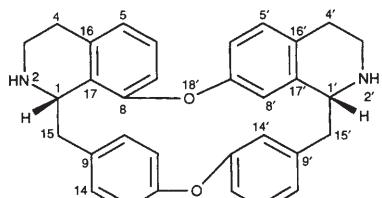
Nupharidin



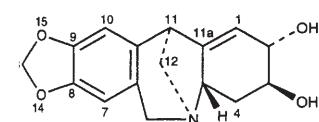
Ormosanin



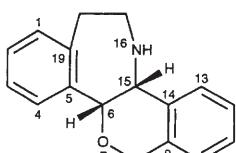
18-Oxyohimban(‡)



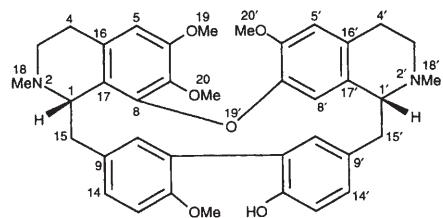
Oxyacanthan



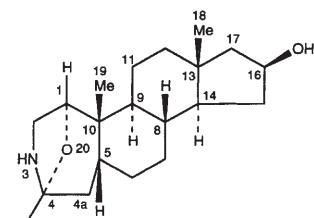
Pancracin



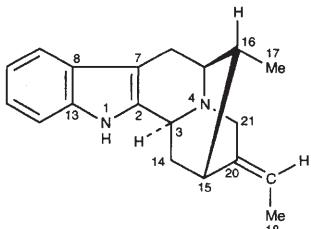
Rheadan



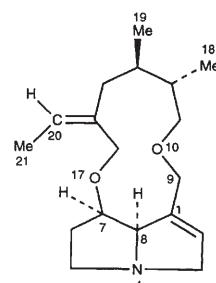
Rodiasin



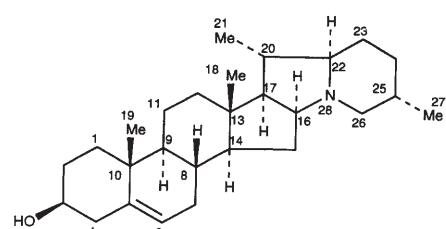
Samandarin



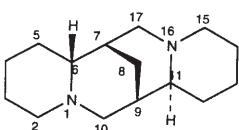
Sarpgagan



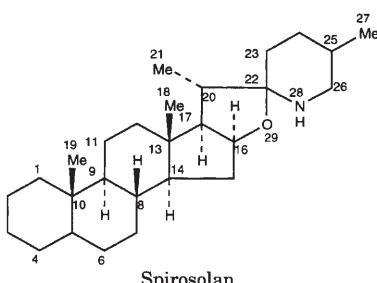
Senecionan



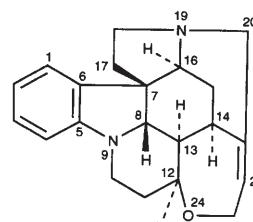
Solanidin



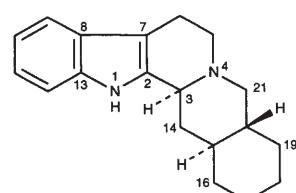
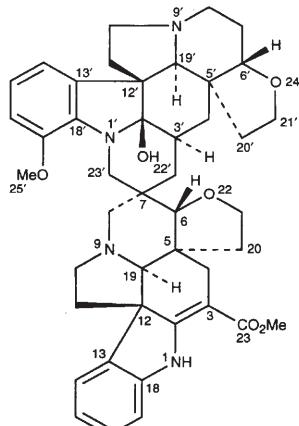
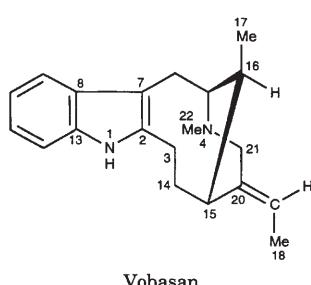
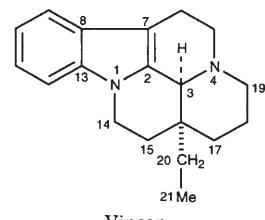
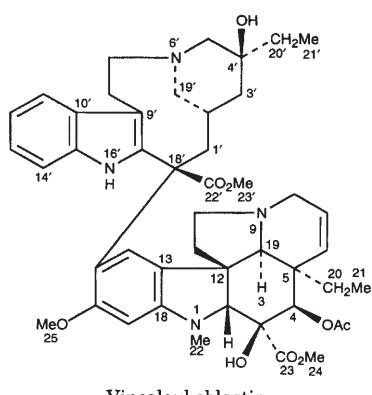
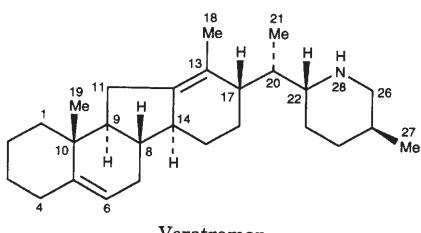
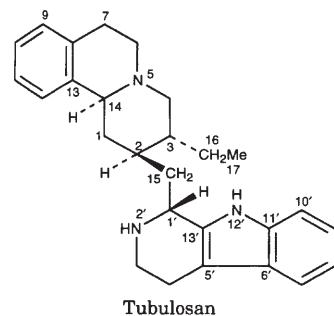
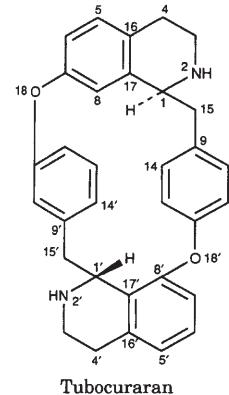
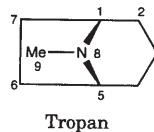
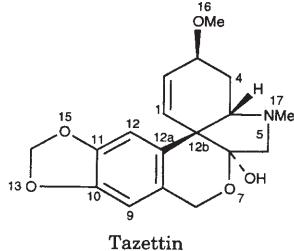
Spartein



Spirosolan

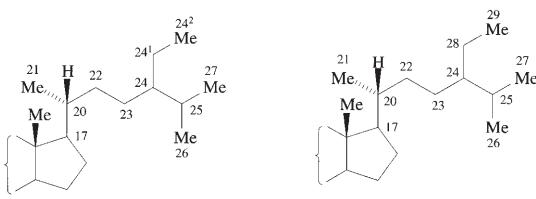


Strychnidin

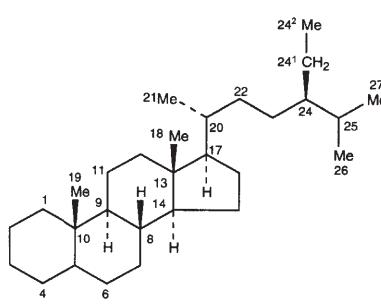
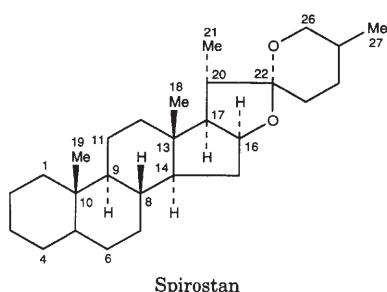
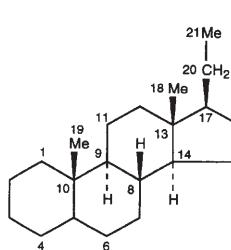
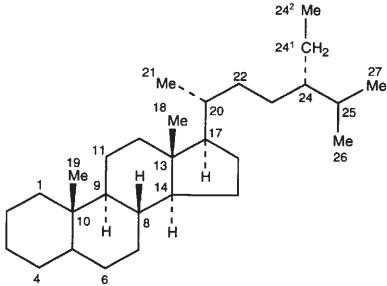
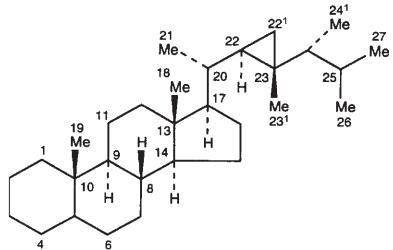
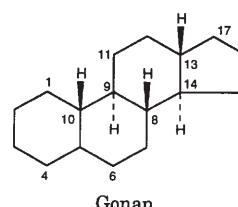
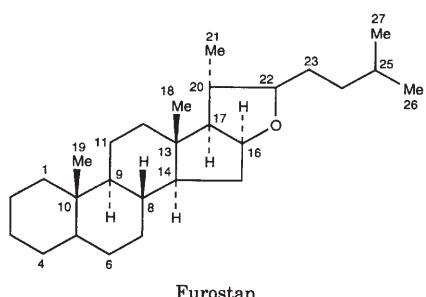
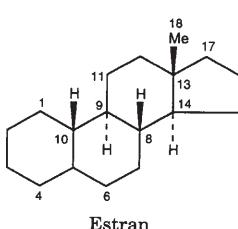
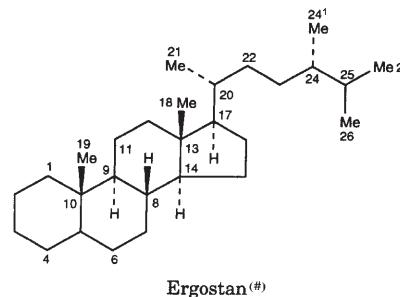
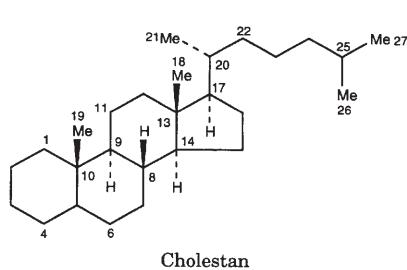
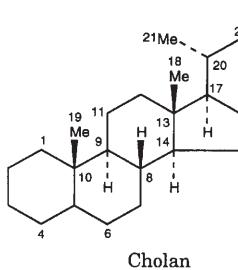
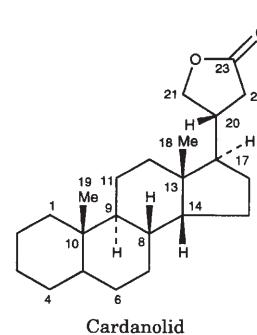
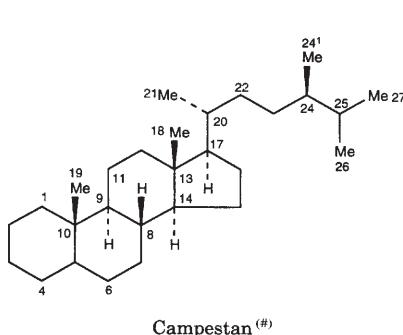
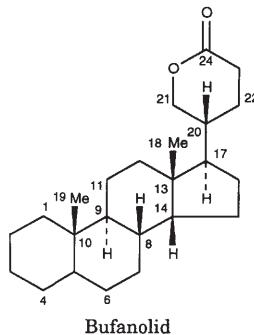
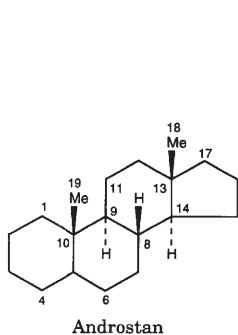


## Sterioide

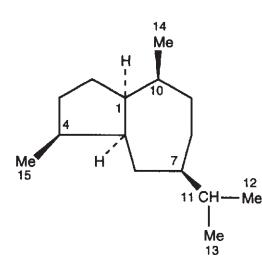
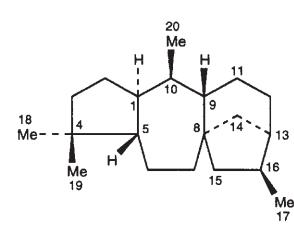
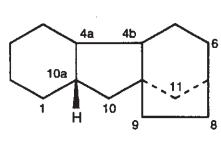
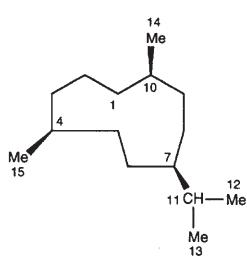
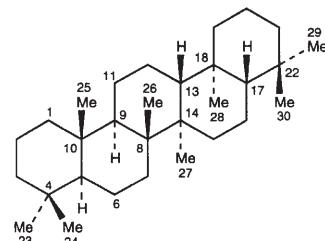
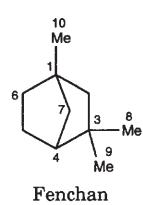
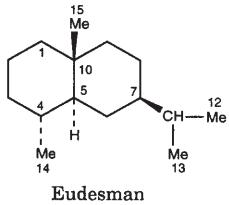
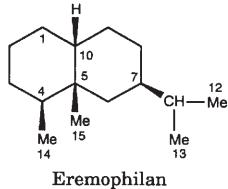
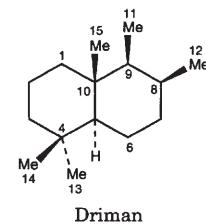
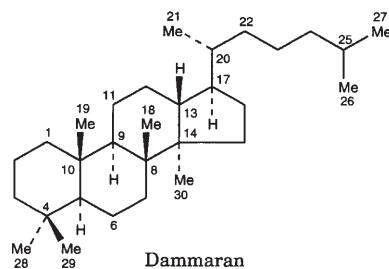
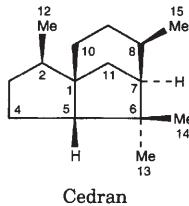
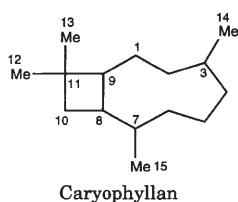
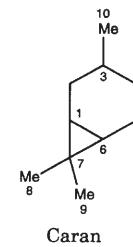
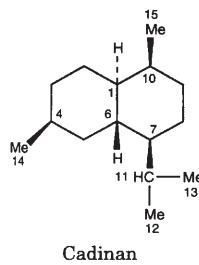
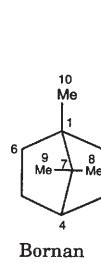
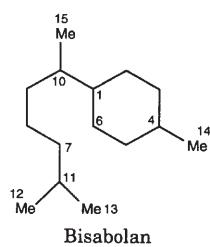
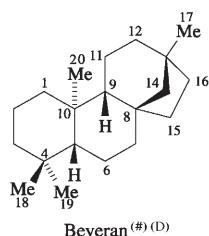
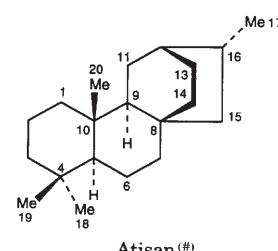
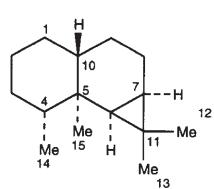
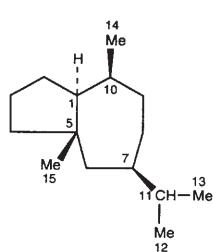
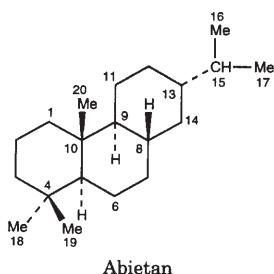
Die Nummerierung zusätzlicher Kohlenstoffatome an einer Steroidseitenkette wurde in der IUPAC-IUB-Steroidnomenklatur 1989<sup>[4]</sup> (siehe Regel 3S-1.1<sup>(D)</sup>) geändert. Die ältere Nummerierung wird vom *Chemical Abstracts Service* noch immer verwendet. Die Unterschiede der beiden Bezifferungssysteme sind in Schema 57 dargestellt. Sie sind bei der Bezeichnung von Campestan, Ergostan, Gorgostan, Poriferastan und Stigmastan zu beachten.<sup>(#)</sup>



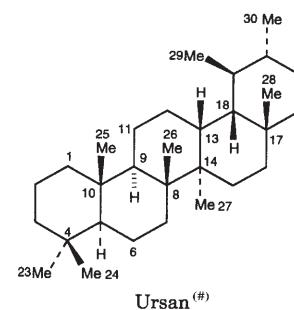
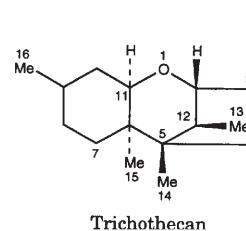
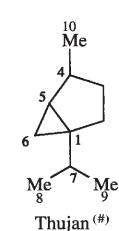
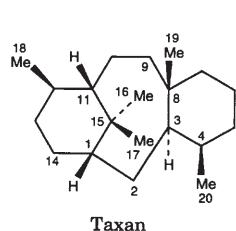
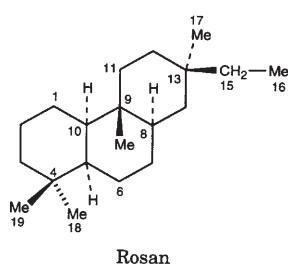
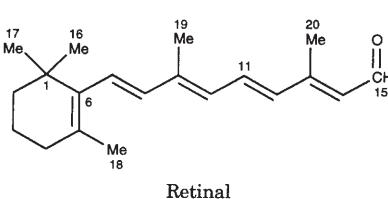
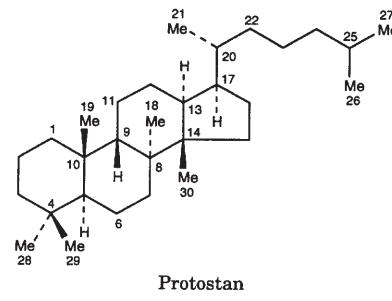
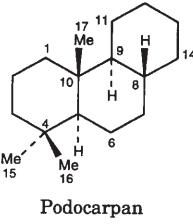
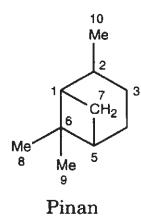
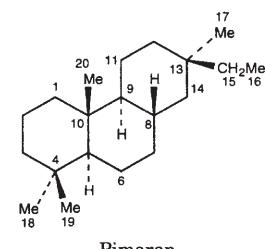
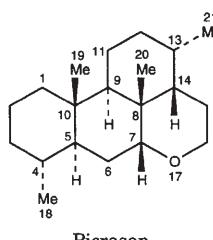
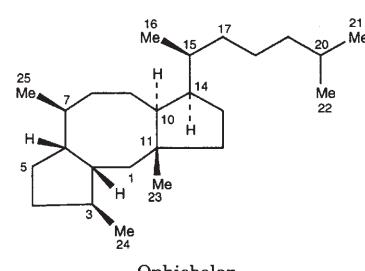
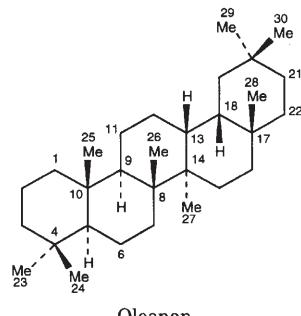
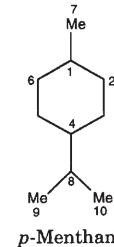
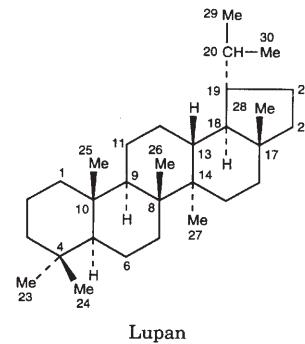
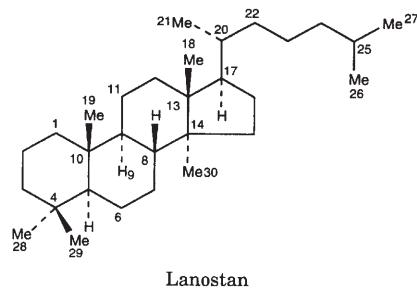
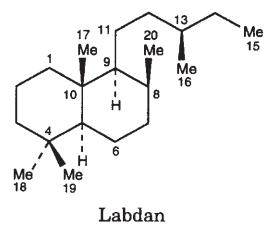
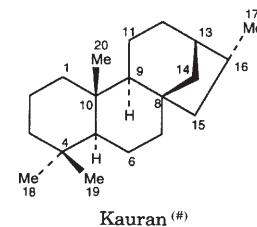
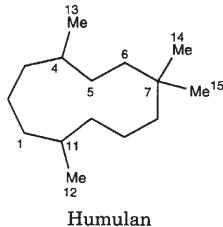
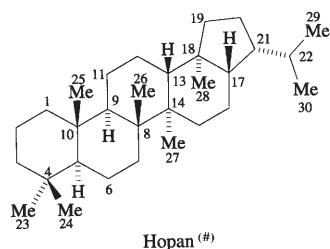
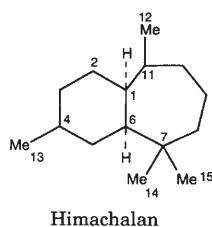
**Schema 57.** Vergleich der alten und neuen Regeln zur Nummerierung zusätzlicher Kohlenstoffatome an einer Steroidseitenkette.



Terpenoide<sup>(#)</sup>

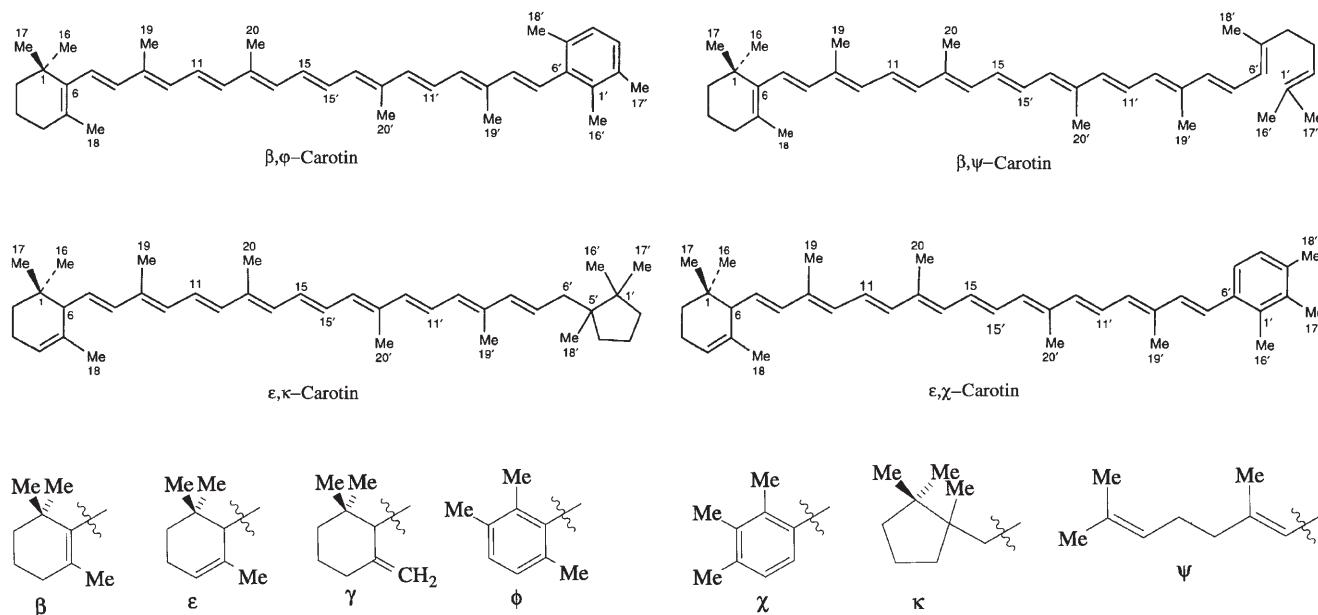


# IUPAC-Empfehlungen



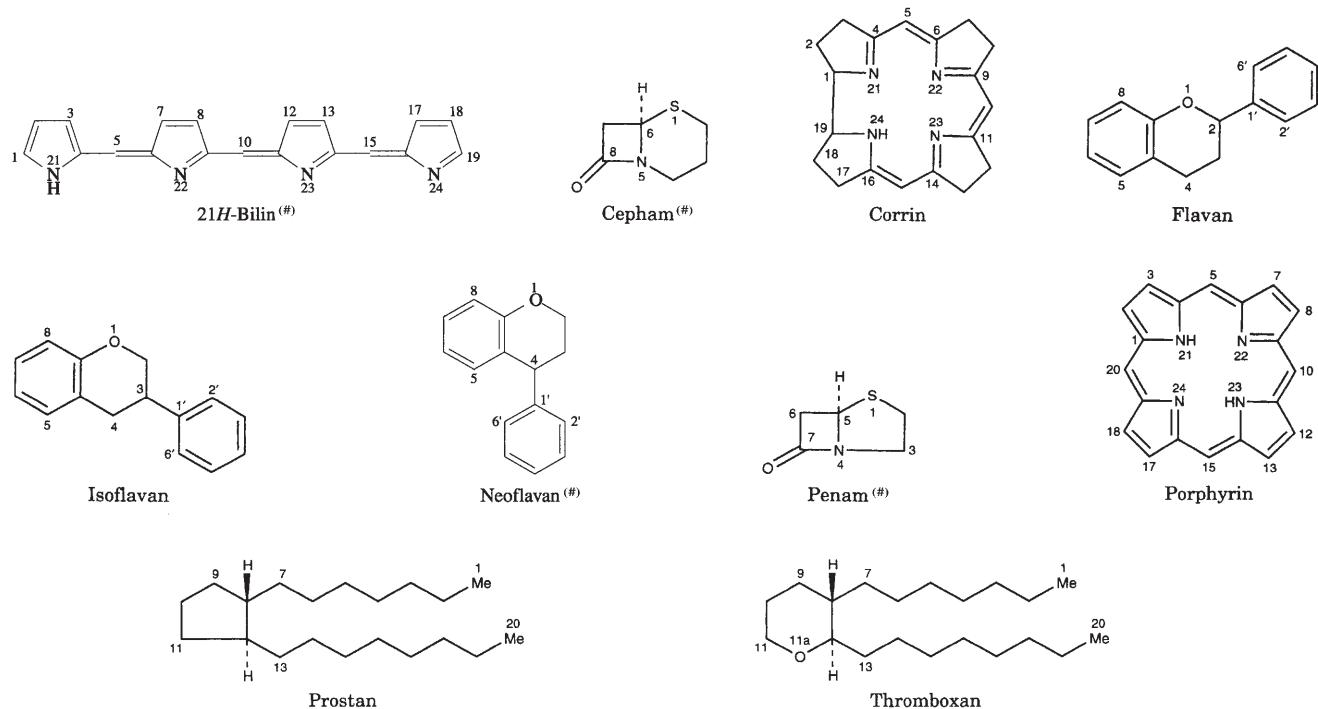
Es gibt 28 mögliche Carotinstammverbindungen, von denen 4 in Schema 58 exemplarisch gezeigt sind. Die 28 Carotine erhält man durch die vollständige Permutation der

ebenfalls gezeigten sieben Endgruppen (siehe Regel 3.2 der Carotinoidnomenklatur<sup>[5]</sup>).<sup>(#)</sup>



Schema 58. Vier der möglichen Carotinstammverbindungen und die Endgruppen, die zum Ableiten der übrigen benötigt werden.

### Sonstige Grundstammverbindungen



- [1] „Nomenclature of Organic Chemistry. Section F: Natural Products and Related Compounds (Recommendations 1976)“: *IUPAC Information Bulletin, Appendices on Provisional Nomenclature, Symbols, Terminology, and Conventions*, Nr. 53, Dezember **1976**; (auch in *Eur. J. Biochem.* **1978**, 86, 1–8; *Biochemical Nomenclature and Related Documents*, 2. Aufl. (Hrsg.: IUBMB), Portland Press, London, **1992**, S. 19–26<sup>(D)</sup> und in Lit. [2]); deutsche Ausgabe: siehe Lit. [2].
- [2] *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: Deutscher Zentralausschuß für Chemie, Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie, 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**.
- [3] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds* (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**. Man beachte auch die zur englischen Ausgabe publizierten Korrekturhinweise (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/bibliog/errata.html>; <http://www.iupac.org/reports/1999/7107favre/index.html>.
- [4] „Nomenclature of Steroids“: *Pure Appl. Chem.* **1989**, 61, 1783–1822 [auch in: *Eur. J. Biochem.* **1989**, 186, 429–458 sowie in *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<sup>(D)</sup>].
- [5] „Nomenclature of Carotenoids“: *Pure Appl. Chem.* **1975**, 41, 405–431.
- [6] „Nomenclature of Vitamin D“: *Pure Appl. Chem.* **1982**, 54, 1511–1516 (auch in: *Arch. Biochem. Biophys.* **1982**, 218, 342–346; *Endokrinol. Inf.* **1982**, 2, 53–64; *Eur. J. Biochem.* **1982**, 124, 223–227; *Mol. Cell. Biochem.* **1982**, 49, 177–181).
- [7] „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems: *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 143–216.
- [8] „Nomenclature of Lignans and Neolignans“: *Pure Appl. Chem.* **2000**, 72, 1493–1523 (die deutsche Übersetzung ist erschienen in *Angew. Chem.* **2005**, 117, 2339–2351).
- [9] „Definitive Rules for Nomenclature of Steroids“: *Pure Appl. Chem.* **1972**, 31, 283–322. Diese 2. Auflage wurde durch die Ausgabe von 1989<sup>[4]</sup> ersetzt.
- [10] Der Originaltext wurde von einer Arbeitsgruppe der Commission on Nomenclature of Organic Chemistry der Organic Chemistry Division der International Union of Applied Chemistry erarbeitet. Die Arbeitsgruppe (1982–1997) umfasste als Mitglieder J. R. Bull, H. A. Favre, M. A. C. Kaplan, L. Maat, A. D. McNaught, G. P. Moss, W. H. Powell, R. Schoenfeld<sup>†</sup> und O. Weißbach. Der Kommission gehörten folgende Personen an: Titular-Mitglieder: O. Achmatowicz (1979–1987), J. Blackwood (1996–1998), H. J. T. Bos (1987–1995, stellvertretender Vorsitzender 1991–1995), B. J. Bossenbroek (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), D. Hellwinkel (1979–1987, stellvertretender Vorsitzender 1981–1987), B. J. Herold (1994–1997), K. Hirayama (1975–1983), M. V. Kisakürek (1994–1997, stellvertretender Vorsitzender 1996–1997), A. D. McNaught (1979–1987), G. P. Moss (1977–1987, Vorsitzender 1981–1987, stellvertretender Vorsitzender 1979–1981), R. Panico<sup>†</sup> (1981–1991, stellvertretender Vorsitzender 1989–1991), W. H. Powell (Schriftführer 1979–1989), J. C. Richer (1979–1989, stellvertretender Vorsitzender 1987–1989), P. A. S. Smith (1983–1991, Vorsitzender 1987–1991), D. Tavernier (1991–1995), J. G. Traynham (ab 1991, Schriftführer ab 1994), O. Weißbach (1987–1991), J. L. Wiśniewski (ab 1991); assoziierte Mitglieder: O. Achmatowicz (1987–1989), K. Blaha<sup>†</sup> (1979–1987), H. J. T. Bos (1983–1987), A. J. Boulton (1983–1987), J. R. Bull (1985–1987), F. Cozzi (1994–1995), D. R. Eckroth (1975–1983), F. Fariña<sup>†</sup> (1989–1994), H. A. Favre (1987–1989), J. H. Fletcher (1975–1983), A. A. Formanovsky (ab 1998), P. M. Giles, Jr. (1983–1989), E. W. Godly (1979–1987), P. Grünanger (1987–1993), H. Grünewald (1989–1991), H. E. Gutmann (1983–1989), J. Heger (1985–1989), K.-H. Hellwich (ab 1998), D. Hellwinkel (1987–1989), B. J. Herold (ab 1998), K. Hirayama (1983–1987), R. J.-R. Hwu (1989–1997), M. A. C. Kaplan (1989–1997), M. V. Kisakürek (1987–1993 und ab 1998), S. R. Klesney (1979–1985), A. J. Lawson (ab 1991), W. Liebscher (1989–1997), K. L. Loening<sup>†</sup> (1979–1983), N. Lozac'h (1977–1987), A. D. McNaught (1987–1989), M. Mikolajczyk (1989–1997), G. P. Moss (1987–1989), J. Nyitrai (ab 1994), R. Panico<sup>†</sup> (1979–1981), J. Rigaudy (1981–1985), C. Schmitz (1989–1993), R. Schoenfeld<sup>†</sup> (1981–1987), H. A. Smith, Jr. (ab 1994), P. A. S. Smith (1979–1983), J. H. Stocker (ab 1991), D. Tavernier (1987–1991, 1996–1997), J. G. Traynham (1989–1991), S. S.-C. Tsay (ab 1998), F. Vögtle (1972–1983), O. Weißbach (1979–1987), A. Yerin (ab 1998); nationale Vertreter: H. Y. Aboul Enein (Saudi-Arabien, 1988–1989), O. Achmatowicz (Polen, 1989–1991), A. T. Balaban (Rumänien, 1983–1989), R. Bicca de Alencastro (Brasilien, 1994–1997), H. J. T. Bos (Niederlande, 1981–1983), J. R. Bull (Südafrika, 1983–1985), J. R. Cannon (Australien, 1982–1987), K. C. Chan (Malaysia, 1983–1987), S. Chandrasekaran (Indien, 1994–1997), Q. Y. Chen (China, ab 1991), G. Déak<sup>†</sup> (Ungarn, 1979–1992), F. Fariña<sup>†</sup> (Spanien, 1987–1989), A. A. Formanovsky (Russland, 1996–1997), M. J. Gašić (Jugoslawien, 1989–1993), E. W. Godly (Großbritannien, 1994–1997), P. Grünanger (Italien, 1984–1987), B. J. Herold (Portugal, 1991–1993), W.-Y. Huang (China, 1981–1987), S. Ikegami (Japan, ab 1986), A. K. Ikizler (Türkei, 1987–1997), J. Kahovec (Tschechische Republik, ab 1989), M. A. C. Kaplan (Brasilien, 1983–1985), P. Kristian (Slowakei, 1994–1997), G. L'abbé (Belgien, 1981–1985), Eun Lee (Republik Korea, ab 1994), X. T. Liang (China, 1987–1993), L. Maat (Niederlande, 1989–1991 und ab 1996), G. Mehta (Indien, 1983–1985), G. P. Moss (Großbritannien, ab 1998), J. Nyitrai (Ungarn, 1992–1993), L. J. Porter (Neuseeland, 1987–1995), J. A. Retamar (Argentinien, 1980–1985), J. A. R. Rodrigues (Brasilien, ab 1998), H. Schick (Deutschland, 1987–1991), R. Schoenfeld<sup>†</sup> (Australien, 1980–1981), S. Swaminathan (Indien, 1985–1987), D. Tavernier (Belgien, 1986–1987), A. Varvoglou (Griechenland, 1991–1993), M. S. Wadia (Indien, ab 1996).
- [11] Die Berichtigung wurde von folgenden Personen zur Veröffentlichung vorbereitet: H. A. Favre, P. M. Giles, Jr., K.-H. Hellwich, A. D. McNaught, G. P. Moss, W. H. Powell.