

## ÜBER NOMENKLATURPROBLEME IN DER STEREOCHEMIE

A. P. TERENTIEV and V. M. POTAPOV  
Faculty of Organic Chemistry, Moscow State University

(Received 10 January 1957)

**Zusammenfassung**—Das geschilderte System zur Bezeichnung des räumlichen Baues der organischen Moleküle erlaubt auf Grund einer einfachen allgemeingültigen Vereinbarung die Namen der stereoisomeren Verbindungen der verschiedensten Art zu bilden. Diese Bezeichnungen hängen nicht von irgend einem willkürlich gewählten "Schlüssel" ab, sondern beziehen sich unmittelbar auf den räumlichen Bau des Moleküls. Das ist zur Zeit, wo die Methoden zum Studium der absoluten Konfiguration immer sicherer werden,—besonders wichtig.

Die Bezeichnungen können sowohl aus dem Raummodell, so auch aus der Projektionsformel abgeleitet werden, wobei der umgekehrte Übergang von dem Name zum Modell oder zur Projektionsformel leicht und anschaulich geschieht. Damit ist eine Möglichkeit gegeben, die komplizierte zeichnerische Darstellung von Raumformeln durch einen Namen zu ersetzen. Das ist besonders für Registrier-Zwecke und für andere Fälle wichtig, wo keine Raumformeln und Zeichnungen gebracht werden können.

Es ist auch ein Vorschlag zur Bezeichnung der Konformation organischer Moleküle eingebbracht.

**Abstract**—Based on a simple, universally valid agreement, the system described in this article for the designation of the steric structure of organic molecules provides a nomenclature for a great variety of stereoisomeric compounds. These designations do not depend on an arbitrarily selected "key," but refer directly to the steric structure of the molecule. This is of particular importance at the present time, when the methods for the investigation of absolute configuration are becoming increasingly reliable.

The designations can be derived either from the three-dimensional model or from the projection formula, so that the construction of the model or projection formula from the name is easily done. Thus it becomes possible to replace the complicated diagrammatic presentation of steric formulae by a name. This is of particular importance in filing and in other cases where three-dimensional formulae or diagrams cannot be used.

A proposal is also made for the designation of the conformation of organic compounds.

IM Laufe der geschichtlichen Entwicklung der Stereochemie, die vor einigen Jahren (wenn man als Anfangsdatum die klassischen Arbeiten von L. Pasteur aus dem Jahre 1848 festlegt) in ihr zweites Jahrhundert getreten ist,—fehlte es nicht an Vorschlägen auf dem Gebiete der stereochemischen Nomenklatur.\* Es finden sich darunter Vorschläge, die von den prominentesten Gelehrten stammen: es genügt die Namen von A. Baeyer, P. Walden, W. Meyer, E. Fischer zu nennen. Trotzdem fehlt bis zu den heutigen Tagen ein allgemein brauchbares und ein allgemein anerkanntes System, dass die Kennzeichnung des räumlichen Baues der organischen Moleküle in den Benennungen gestatten würde.

Im Jahre 1951 erschien eine Schrift von R. S. Cahn und Ch. K. Ingold,<sup>3</sup> die einen wichtigen Schritt vorwärts auf dem Gebiete der stereochemischen Nomenklatur bedeutete. Während alle vorhergehenden Vorschläge die Bezeichnungen auf die

\* Eine kurze Ubersicht über die Entwicklung der stereochemischen Bezeichnungen findet sich in unseren Arbeiten.<sup>1-2</sup>

Projektionsformeln zurückführten,—brachten Cahn und Ingold als erste den prinzipiell wichtigen Vorschlag—die stereochemischen Bezeichnungen direkt auf das Raummodell zu beziehen, ohne dieses Modell zur bedingten Projektionsformel zu reduzieren. Dieser Grundgedanke war überaus wertvoll, doch seine praktische Verwertung wurde durch die verhängnisvolle Lösung einiger zugehöriger Fragen erschwert. Diese Fragen sind: die Form der Bezeichnungen, d.h. die Wahl der Zeichen, die die Besonderheiten des räumlichen Baues veranschaulichen sollen; und die Methoden der Klassifizierung, d.h. die Regeln, auf Grund derer die Wahl der Bezeichnung geschieht.

Vor einigen Monaten erschien eine neue Schrift von R. S. Cahn, C. K. Ingold, und V. Prelog,<sup>4</sup> in der das System aus dem Jahre 1951 teilweise abgeändert und erweitert wird. Die Abänderung betrifft die Form der Bezeichnungen: mit vollem Rechte verwerfen jetzt die Verfasser die Zeichen *D* und *L*, die ja schon so verschiedentlich in der Stereochemie gebraucht wurden, das ihre Verwendung in einem *neuen* System die Verwirrung noch vergrössern würde. Die Verfasser wählen andere Zeichen, die sie speziell für die Angabe der *absoluten* Konfiguration—also des physikalisch erforschten wirklichen räumlichen Baues der asymmetrischen Moleküle, verwendet sehen wollen. Damit ist eine der schwachen Stellen der Arbeit aus dem Jahre 1951 glücklich aus dem Wege geschafft.

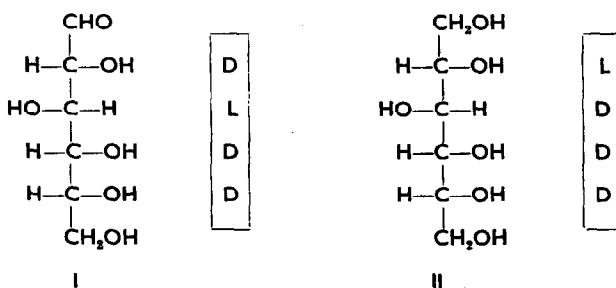
Leider ist aber die zweite schwache Stelle—die Regeln zur Wahl der Bezeichnungen,—geblieben. Wie bekannt ist, ordnen die Verfasser die asymmetrischen Konfigurationen auf Grund der räumlichen Lage der Gruppen an, deren Rangordnung auf Grund einer von besonderen Regeln festgelegten Abzählung der Atomnummern ermittelt wird. Es scheint auf den ersten Blick, als ob sie auch gute Gründe dazu haben: das so geschaffene System ist von den Namen der Verbindungen, von der organisch-chemischen Nomenklatur völlig unabhängig, was nach der Meinung der Verfasser bei der heutigen Verwirrung in der Nomenklatur einen wichtigen Vorteil bedeutet. Uns scheint es aber der wesentlichste Nachteil des Cahn-Ingold-Prelog-System zu sein!

Die Anordnung der Gruppen nach den Atomnummern ist nicht eine Folge irgend eines Naturgesetzes—es ist ein Kunstgriff, der eigentlich ihre *formelle* Systematisierung gestattet. So wird ermöglicht, dass durch die Anwendung gewisser (letzten Endes willkürlicher!) Regeln die Raumstruktur mittels besonderer Zeichen im Namen wiedergegeben wird. Diese Zeichen sind *unbedingt* mit dem Namen, mit der Nomenklatur verbunden. Denn so lange wir das Raummodell oder die zugehörige Projektionsformel vor Augen haben,—brauchen wir gar keine besonderen Zeichen, um die Antipoden zu unterscheiden: wir *sehen* diese Unterschiede direkt am Modell oder an der Projektionsformel! Die Notwendigkeit besonderer Bezeichnungen entsteht aber sofort, wenn wir das Modell (die Projektionsformel) durch einen Namen ersetzen wollen. Die stereochemischen Bezeichnungen werden also praktisch nur im Zusammenhang mit einem Namen gebraucht. Es liegt daher durchaus im Wesen der Sache, wenn die Regeln zur Wahl dieser stereochemischen Bezeichnungen mit den allgemeinen Nomenklaturregeln verwandt sind. Besondere, von der Nomenklatur unabhängige Regeln, die von Cahn-Ingold-Prelog eingeführt werden,—bedeuten eine unerwünschte Komplizierung beim praktischen Gebrauch des Systems. Dieser Nachteil des C—I-Systems wurde schon von Freudenberg<sup>5</sup> hervorgehoben.

Wie gesagt, ist es eine wichtige Errungenschaft von Cahn-Ingold, dass sie als erste

das Raummodell als Grundlage betrachten, und ihre Bezeichnungen nicht auf die Projektionsformel zurückführen, da die Formel ja ganz verschieden geschrieben werden kann. Aber bei der *praktischen Anwendung* eines Bezeichnungssystems ist es wichtig eine Möglichkeit zu haben, die stereochemischen Bezeichnungen nicht nur aus dem Modell, sondern auch aus der Projektionsformel zu ermitteln. In dieser Hinsicht enthält die neue Arbeit von Cahn-Ingold-Prelog einen wichtigen Fortschritt im Vergleich mit der Arbeit aus dem Jahre 1951: jetzt bringen die Verfasser eine "Konversionsregel," die die Bezeichnung mit der Projektionsformel nach Fischer verbindet.

Trotzdem ist aber auch jetzt die Verbindung der C-I-P-Bezeichnungen mit der Projektionsformel nicht immer anschaulich genug. Um ein Beispiel zu bringen, genügt es die Bezeichnungen der asymmetrischen Atome der Glukose (I) und des zugehörigen Hexits (II) zu vergleichen:



Die Anordnung der Gruppen um die asymmetrischen Atome in I und II ist völlig egal. Die beiden unteren Atome erhalten in I und II auch die gleiche Bezeichnung, bei den oberen asymmetrischen Atomen ist aber die Bezeichnung in I und II entgegengesetzt. Die anschauliche Verbindung mit der Projektionsformel fehlt und es ist nicht leicht die nötigen Bezeichnungen zu ermitteln.

Im Jahre 1955 haben wir in Zusammenarbeit mit A. N. Kost und A. M. Zuckerman ein allgemeines System der stereochemischen Bezeichnungen entwickelt, dass unserer Meinung nach die Vorteile des Cahn-Ingold System beibehält, ihre Nachteile aber nicht besitzt.

Wir arbeiten auch am Modell, ähnlich wie es im Jahre 1951 Cahn-Ingold beschrieben haben, gründen aber die Bestimmung der Rangordnung der Gruppen auf den *allgemeinen Regeln der organisch-chemischen Nomenklatur*. Die Bezeichnungen können sowohl aus dem Raummodell, wie aus der Projektionsformel nach Fischer leicht ermittelt werden. Die Grundlagen des Systems sollen nachstehend nochmals kurz geschildert werden. Wegen der Einzelheiten wird auf die früheren Veröffentlichungen verwiesen.<sup>1, 2, 6</sup>

In dem allgemeinsten Falle ist ein asymmetrisches Kohlenstoffatom ein Teil der Kohlenstoffkette—einer acylischen oder cyklischen, einer Haupt-oder Seitenkette.

<sup>1</sup> A. P. Terentiev, A. N. Kost, A. M. Zuckerman, und V. M. Potapov Nomenclature of Organic Compounds. *Izd. Akad. Nauk. SSSR Moscow*, 94–101 (1955).

<sup>2</sup> A. P. Terentiev, V. M. Potapov, A. N. Kost, und A. M. Zuckerman *Vestnik MGU*, 1955, No. 6, 97. Teilweise abgedruckt in *Chemische Technik* 7, 579 (1955).

<sup>3</sup> R. S. Cahn und C. K. Ingold *J. Chem. Soc.* 612 (1951).

<sup>4</sup> R. S. Cahn und C. K. Ingold *V. Prelog Experientia* 12, 81 (1956).

<sup>5</sup> K. Freudenberg, und W. Lwowski *Lieb. Ann.* 594, 80 (1955).

<sup>6</sup> A. P. Terentiev, A. N. Kost, A. M. Zuckerman, und V. M. Potapov Vorschläge zur systematischen Nomenklatur organischer Verbindungen. *Izd. INI Akad. Nauk. SSSR Moscow* (1955).

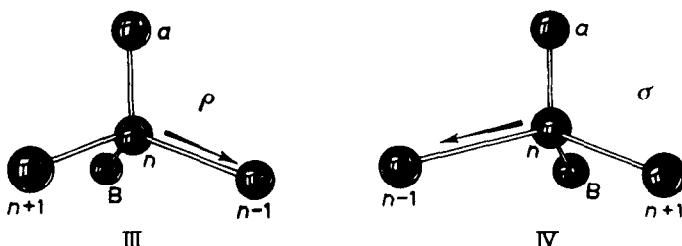
Zwei Valenzen des asymmetrischen Atoms verbinden ihn gewöhnlich mit der Kette (Hauptkette), die dritte und vierte Valenz sind durch zwei *verschiedene* Substituenten besetzt. Wenn wir diese Substituenten "a" und "b" bezeichnen, und die Abschnitte der Hauptkette " $n - 1$ " (der Anfangsabschnitt der Kette, wo die Numerierung angefangen wurde) und " $n + 1$ " (der Endabschnitt der Kette), so können die zwei Raummodelle durch folgende Schemen veranschaulicht werden:

Um die Raumstruktur eindeutig im Namen wiederzugeben, muss man die gegenseitige räumliche Lage der vier Gruppen am asymmetrischen Atom angeben. Um die Lage eines Punktes im Raum genau festzulegen, muss man seine Koordinaten bezüglich eines Achsenystems angeben. Wir wählen als eine Achse die Hauptkette mit der ihr nach den gewöhnlichen Nomenklaturregeln erteilten Numerierung der Atome. Somit erhalten wir, ohne neue Regeln einzuführen, zwei genaue "Koordinaten": die Richtung der Achse (Numerierungsrichtung) und die dem asymmetrischen Kohlenstoff zugeteilte Nummer. Um die Raumstruktur eindeutig wiederzugeben, genügt es, die Lage *eines* der beiden Substituenten (*a* oder *b*) hinsichtlich der genannten Koordinaten anzugeben.

Zu diesem Zwecke bedienen wir uns folgender Methode: wir denken sich den Beobachter so auf das asymmetrische Atom gestellt, dass er längs des Valenzstriches disloziert sei, dass das asymmetrische Atom mit einem der Substituenten\* verbindet (z.B. "*a*"). Wenn jetzt der Beobachter in der Richtung des Winkels blickt, der durch die Atome  $(n - 1) - n - (n + 1)$  verbindenden Valenzstriche gebildet wird, so weist das Bild in Abhängigkeit von der Konfiguration des asymmetrischen Atoms "*n*" die folgenden Merkmale auf:

(1) Die Numerierungsrichtung kann von links nach rechts verlaufen. Das ist im Schema III der Fall. Solch eine Konfiguration wird mit dem griechischen Buchstaben  $\rho$  bezeichnet.

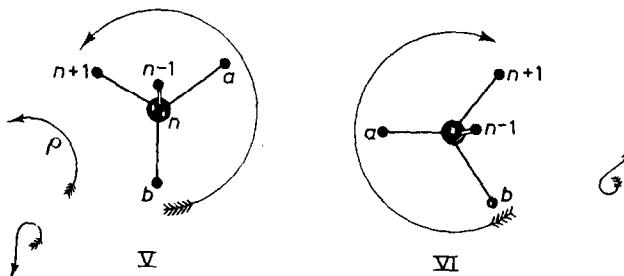
(2) Die Numerierungsrichtung kann, wie das in IV der Fall ist, von rechts nach links verlaufen. Das entspricht der Bezeichnung  $\sigma$ .



Die Buchstaben  $\rho$  und  $\sigma$  sind willkürlich gewählt, namentlich auch deshalb, weil sie bisher für Bezeichnungen in der Nomenklatur organischer Verbindungen nicht angewandt wurden und so keinen Anlass zu Missverständnissen geben können. Ihrer Form nach sind diese Buchstaben antisymmetrisch, was man mit folgender mnemonischer Regel zur Ermittlung der  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung in Zusammenhang bringen kann: stellt man das Tetraeder des asymmetrischen Atoms so, dass in der auf den Beobachter gerichteten Ecke sich der Anfang der Kette befindet, so wird der Beobachter die drei

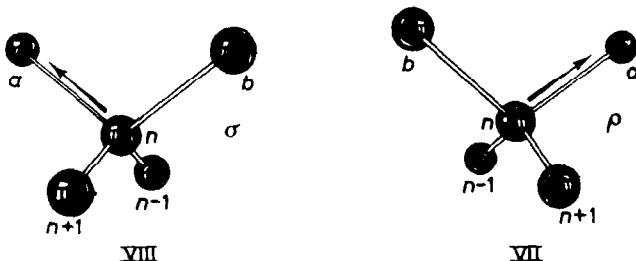
\* Es soll der Regel nach der "rangälteste" Substituent sein, aber, wie später gezeigt wird, geschieht nichts schlimmes, wenn man auch irrtümlich den anderen Substituent wählt.

restlichen Substituenten in der Basis des Tetraheders, die Ecke ( $n - 1$ ) umgebend, erblicken (V und VI).



Besitzt das asymmetrische Atom eine  $\rho$ -Konfiguration (V), so liegen die drei Gruppen in der Reihenfolge der steigenden Rangordnung ( $b < a < n + 1$ ) gegen den Uhrzeigersinn—genau so, wie bei dem griechischen Buchstaben  $\rho$  eine Bewegung gegen den Uhrzeigersinn vollzogen wird, wenn man ihn vom Zentralteil zur Peripherie schreibt. Bei der  $\sigma$ -Konfiguration weist die Lage der Gruppen und die Bewegung beim Schreiben den Uhrzeigersinn auf.

Es ist auch ein dritter Handgriff für die Ermittlung der  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung möglich: stellen wir uns vor, dass der Beobachter auf dem asymmetrischen Atom innerhalb des Winkels ( $109^\circ 28'$ ), der durch die Valenzstriche zu den Substituenten "a" und "b" gebildet ist, steht, und in Richtung des Atoms " $n + 1$ " blickt. Bei einer  $\rho$ -Konfiguration wird der rangälteste Substituent links vom Beobachter liegen (VII), bei einer  $\sigma$ -Konfiguration rechts (VIII).



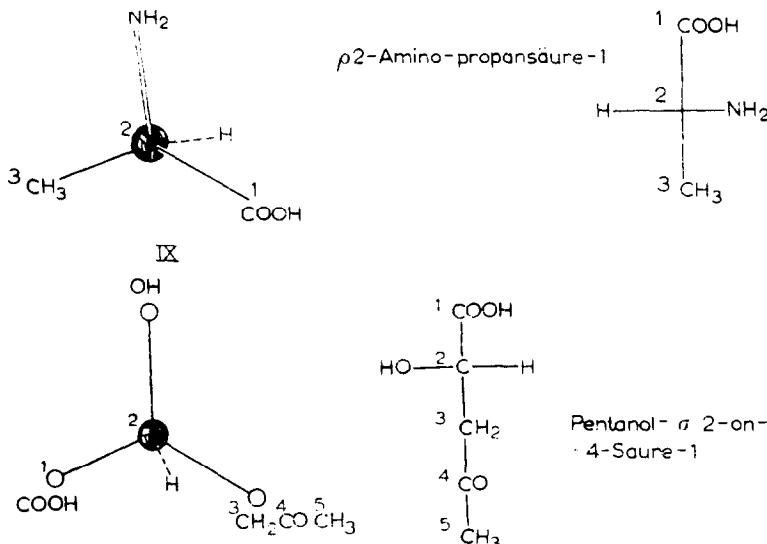
Wenn man schließlich die  $\rho$ - $\sigma$ -Konfiguration nicht an Hand des Modells, sondern an der Projektionsformel nach E. Fischer bestimmt, so gilt die Regel: bei einer Bewegung längs der Hauptkette gemäss der Numerierungsordnung der Atome wird der rangälteste Substituent des asymmetrischen Atomes bei der  $\rho$ -Konfiguration links, und bei der  $\sigma$ -Konfiguration rechts liegen.

Nebenbei gesagt, es ist die *wirkliche* Fischer'sche Projektion gemeint,<sup>7</sup> also die *projektion* einer Konformation, in der die Kohlenstoffkette eine C-ähnliche Form hat und mit dem "offenen" Teil des "C" der Projektionsfläche zugewandt ist. Diese Bemerkung scheint uns notwendig, da in der Literatur auch andersartige Projektionsverfahren irrtümlich als "Fischersche Projektionsformeln" auftreten. Das ist z.B. in dem bekannten Buch von Schlenk und Bergman der Fall.<sup>8</sup>

<sup>7</sup> E. Fischer Ber. 24, 2683 (1891).

<sup>8</sup> W. Schlenk und E. Bergmann *Ausführliches Lehrbuch der organischen Chemie* Bd. I, s. 154. Leipzig-Wien, Franz Deuticke (1932).

Alle 4 beschriebenen Handgriffe zur Bestimmung der  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung sind gleichberechtigt, und führen zum gleichen Resultat. Diese oder jene Methode kann völlig gleichberechtigt angewandt werden, wobei der Anwendende in Abhängigkeit von der Bequemlichkeit des Verfahrens, in Abhängigkeit von der Projektion, oder schliesslich von der Gewohnheit, sich räumliche Modelle in einer bestimmten Weise vorzustellen,—seine Wahl vollziehen kann. Die ermittelte  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung wird in dem Namen durch den entsprechenden Buchstaben kennzeichnet, wobei diese Buchstaben vor der Ziffer stehen, die die Lage des rangältesten Substituenten am asymmetrischen Kohlenstoffatom angibt. So z.B.



Entsprechend werden auch Verbindungen mit mehreren asymmetrischen Atomen und Asymmetrie in cyclischen Verbindungen bezeichnet, wobei die Hauptregel unverändert bleibt und nur in einigen Fällen noch 2 Zusatzregeln zu berücksichtigen sind. Die ausführliche Beschreibung bringen wir hier nicht und verweisen auf die früheren Veröffentlichungen,<sup>1, 2, 6</sup> die außerdem noch die logische Erweiterung der Bezeichnungsweise auf molekulare Asymmetrie (Diphensäuren, Spirane, etc.) enthalten.

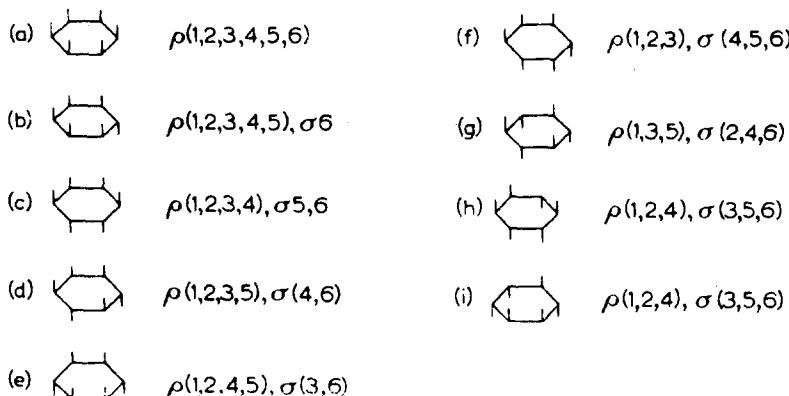
Wir bringen nur noch einige Beispiele der  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung bei komplizierteren Verbindungen.

XI	XII	XIII	XIV
$\text{COOH}$	$\text{COOH}$	$\text{COOH}$	$\text{COOH}$
$-\text{OH}$	$\text{HO}-$	$-\text{OH}$	$-\text{OH}$
$-\text{OH}$	$\text{HO}-$	$-\text{OH}$	$\text{HO-}$
$\text{HO-}$	$-\text{OH}$	$-\text{OH}$	$-\text{OH}$
$\text{COOH}$	$\text{COOH}$	$\text{COOH}$	$\text{COOH}$
XI            XII            XIII            XIV			
XI $\rho(2,3)$ , $\sigma 4$ -Trioxyglutarsäure	XII $\rho(2,3,4)$ , Trioxyglutarsäure	XIII $\rho(2,3,4)$ , Trioxyglutarsäure	XIV $\rho(2,4)$ , $\sigma 3$ -Trioxyglutarsäure
XII $\sigma(2,3)$ , $\rho 4$ -Trioxyglutarsäure		XIV $\rho(2,4)$ , $\sigma 3$ -Trioxyglutarsäure	

Cahn, Ingold, und Prelog bringen diesen Beispiel auch. Das Inosit mit der Raumformel "f" erhielt bei ihnen die Bezeichnung "1R : 2S : 3S : 4S : 5S : 6R".—also

## Stereoisomere Inosite

(Cyclohexanhexole - 1;2,3,4,5,6)

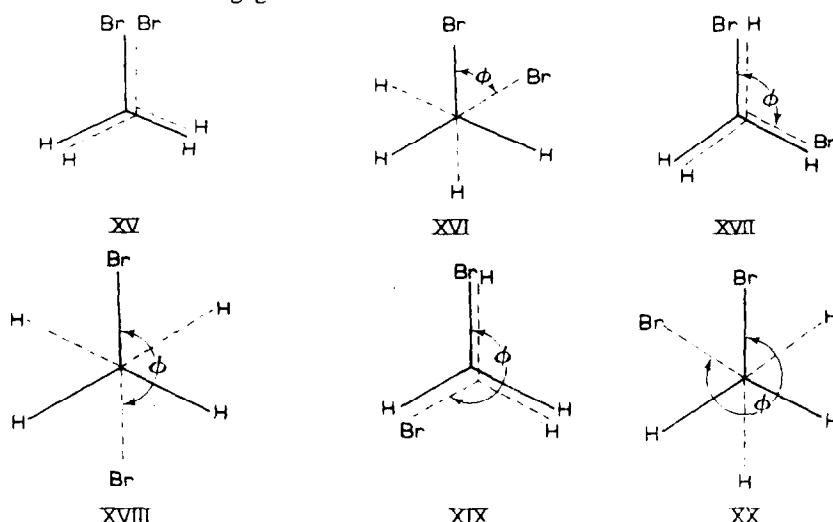


im ganzen  $4S$ - und  $2R$ -Konfigurationen, während das Modell eine gleichmässige Verteilung der Substituenten aufweist (3 oben, 3 unten).

Auch hier ist das  $\rho$ - $\sigma$ -System viel übersichtlicher, da die Bezeichnungen unmittelbar aus der schematischen Formel ersichtlich sind. Die beiden optisch aktiven Inosite (Formeln *h* und *i*) erhalten nach C-I-P die Bezeichnungen  $1R : 2S : 3S : 4S : 5S : 6R$  und  $1R : 2S : 3S : 4R : 5R : 6R$ . Es ist dabei nicht ersichtlich, dass es sich um ein Paar von Enantiomeren handelt.

Die Bezeichnungen für Steroide nach dem  $\rho$ - $\sigma$ -System entsprechen vollkommen den bekannten Bezeichnungen nach L. Fieser: es werden nur die Zeichen  $\alpha$ - $\beta$  entsprechend durch  $\rho$ - $\sigma$  ersetzt. Auch hier ist die  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung anschaulich mit dem Modell und der schematischen Formel verbunden.

Es ist auch möglich ein System zur Bezeichnung der Konformation (Konstellation) zu schaffen.\* Das Prinzip kann man auf dem Beispiel des 1,2-Dibromäthans erklären. Es könnten Konformationsisomere des 1,2-Dibromäthans existieren, die durch folgende Schemen wiedergegeben werden können:



\* Dieser Teil unserer Vorschläge ist früher noch nicht veröffentlicht.

Das Molekül wird hier "von oben"—längs der Achse betrachtet, die beide C-Atome verbindet. Die einzelnen Konformationen unterscheiden sich dabei durch den Winkel  $\varphi$ , den die zum rangältesten Substituenten führenden Valenzen bilden. Es wird von uns vorgeschlagen diesen Winkel immer im Uhrzeigersinn abzulesen und die 6 möglichen Konformationen durch die Angabe dieses Winkels wie folgt zu charakterisieren:

	XV	XVI	XVII	XVIII	XIX	XX
Der Winkel $\varphi$ in Radian-einheiten	0	$1 \cdot \frac{R}{3}$	$2 \cdot \frac{R}{3}$	$3 \cdot \frac{R}{3}$	$4 \cdot \frac{R}{3}$	$5 \cdot \frac{R}{3}$
Bezeichnung	$\varphi^0$	$\varphi^1$	$\varphi^2$	$\varphi^3$	$\varphi^4$	$\varphi^5$

Auf den ersten Blick scheint es, dass die Konformationen XVII und XIX, XVI, und XX gleich sind, aber an Modellen ist es leicht zu sehen, dass alle 6 Konformationen wirklich verschieden sind.

Die einzelnen Konformationen von 1,2-Dibromäthan erhalten somit die Bezeichnungen:

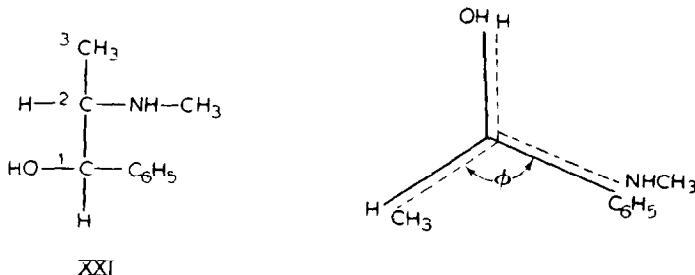
XV 1,2-Dibromäthan- $\varphi^0$

XVI 1,2-Dibromäthan- $\varphi^1$

XVII 1,2-Dibromäthan- $\varphi^2$

XVIII 1,2-Dibromäthan- $\varphi^3$ ; u.s.w.

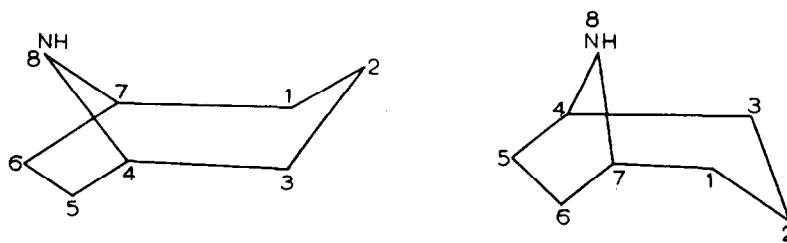
Als ein weiteres Beispiel kann das Ephedrin dienen. Wenn man annimmt, dass seine Konformation der Formel XXI entspricht, so würde das zugehörige Modell folgendermassen aussehen:



Hier sind die rangältesten Substituenten in der Propankette: bei C<sub>1</sub> = Phenyl; bei C<sub>2</sub> = Methyl. Der Winkel  $\varphi$  muss also zwischen ihnen abgelesen werden. Wenn man noch die Konfiguration der 2 asymmetrischen Atome in Betracht zieht, so ergibt sich die Bezeichnung:

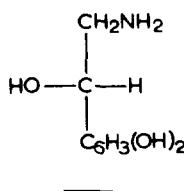
1  $\varphi^2$ -Phenyl- $\sigma$  2-Aminomethyl-propanol- $\sigma$ 1.

Auch die Konformation komplizierter Ringstrukturen kann mittels der vorgeschlagenen Methode bezeichnet werden, z.B.

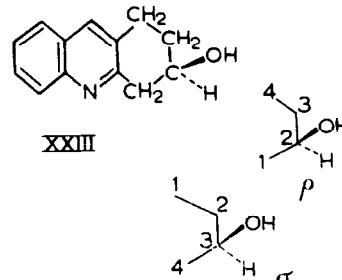


Die richtigen  $\rho$ -Indexe können in diesem und ähnlichen Fällen nur an den Modellen ermittelt werden.

Zum Schluss wollen wir nochmals besonders hervorheben, dass das vorgeschlagene System zur Bezeichnung von Stereoisomeren *nicht* fest an irgend ein *bestimmtes* Nomenklatursystem gebunden ist: die  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnungen können in Verbindung mit einem *jeden* Namen gebraucht werden, der die Struktur der Verbindung abspiegelt. Ein Beispiel dazu: die Verbindungen mit den Projektionsformeln XXII und XXIII, die in der Arbeit von C-I-P angeführt sind:



2-Amino-1(3,4-dioxyphenyl)äthanol- $\rho$   
oder:  
 $\sigma$ -2-Oxy- $\beta$ (3,4-dioxyphenyl)-ethylamin

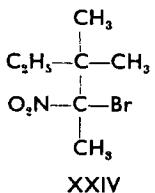


Die Bezeichnung ist bei verschiedener Numerierungsart wohl *verschieden*, aber sie ermöglicht trotzdem einen Übergang zum richtigen Raummodell (oder zur Projektionsformell), und etwas anderes verlangen wir auch nicht von den Bezeichnungen  $\rho$ - $\sigma$ !

Ja, die Hauptkette kann mit Verletzung der Regeln gewählt sein, die Numerierung kann jeglichen Regeln *widersprechen*, der Name kann *falsch* gebildet sein,—aber wenn nur der Name, der erhalten wurde, die Strukturformel richtig zu rekonstruieren erlaubt (jeder Organiker kennt Beispiele dazu!)—ist auch das richtige Raummodell herauszubekommen! Noch desto mehr: man kann schliesslich (irrtümlich oder bewusst) auch die Regeln zur Wahl des rangältesten Substituenten verletzen und damit die  $\rho$ - $\sigma$ -Bezeichnung auf das “falsche” Substituent beziehen. Da aber die Bezeichnungen unmittelbar an der Ziffer stehen, die die Lage *dieses* Substituenten

\* Die Numerierung und Namensbildung gemäß den Vorschlägen von A. P. Terentiev und Mitarbeitern.<sup>9,1,2</sup>  
A. P. Terentiev XIV Internationaler Kongress für reine und angewandte Chemie Referatenband Zürich, No. 408 (1955).

angiebt,—hat das keine Bedeutung zum Übergang zum *richtigen* Raummodell, z.B. aus dem Namen “*ρ3-Brom-3-Nitro-2-Methyl-2-Äthyl-Butan*” erhält man die richtige Projektionsformel XXIV, trotzdem dass in der Benennung die Hauptkette falsch gewählt, die Numerierungsregeln verletzt und die Wahl des rangältesten Substituenten am asymmetrischen Kohlenstoff irrtümlich ist.\*



Diese Beispiele mögen genügen, um zu bestätigen, dass die praktische Verwendung des von uns vorgeschlagenen Systems auf keine Schwierigkeiten wegen der “Verwirrung in der Nomenklatur” stösst: man muss nur immer die *selben Regeln* (können sie noch so falsch sein!), nach denen der Name gebildet wurde, sachgemäß für die Ermittlung der stereochemischen Bezeichnungen anwenden. Uns scheint es praktischer zu sein, als die komplizierten speziell für diesen Fall geschaffenen Regeln von Cahn-Ingold-Prelog zu verwenden.

\* Nötigenfalls kann man diese Eigenart des Systems dazu benutzen, um den für eine genetische Reihe wichtigen Substituenten als den “rangältesten” zu wählen und somit die Bezeichnungen einheitlich für die vergleichenden Verbindungen zu gestalten.