

Kurzer Leitfaden der Nomenklatur der organischen Chemie

K.-H. Hellwich (Deutschland), R. M. Hartshorn (Neuseeland), A. Yerin (Russland), T. Damhus (Dänemark), A. T. Hutton (Südafrika). E-Mail:

organic.nomenclature@iupac.org Träger: IUPAC Division of Chemical Nomenclature and Structure Representation

Version 1.1, June 2021

Übersetzt aus dem Englischen von Johanna Willer (Kiel, Deutschland) und Christian Peifer (Kiel, Deutschland)

1 EINLEITUNG

Um innerhalb der Fachrichtung Chemie und der chemischen Industrie effizient zu kommunizieren sowie den Vorschriften bezüglich Imports/Exports, dem Gesundheitswesen und der Sicherheit zu genügen, bedarf es einer allgemein akzeptierten Nomenklatur. Die „[International Union of Pure and Applied Chemistry](#)“ ([IUPAC](#), deutsch: Internationale Union für reine und angewandte Chemie) gibt Empfehlungen zu vielen Aspekten der Nomenklatur.¹

Die Grundlagen der organischen Nomenklatur sind in diesem Dokument zusammengefasst; zusätzlich gibt es Begleitdokumente zur Nomenklatur der [anorganischen](#)² und der [Polymerchemie](#)³, deren Hyperlinks auf die Originaldokumente verweisen. Die [Principles of Chemical Nomenclature](#) (Grundlagen der chemischen Nomenklatur) bieten eine allgemeine Zusammenfassung der chemischen Nomenklatur.⁴ Einzelheiten werden in [Nomenclature of Organic Chemistry](#), das umgangssprachlich als *Blue Book*⁵ bezeichnet wird, sowie in den entsprechenden Publikationen für anorganische Substanzen ([Red Book](#))⁶ bzw. Polymeren ([Purple Book](#))⁷ umfassend behandelt.

Bitte beachten Sie, dass viele Substanzen mit nicht-systematischen oder semi-systematischen Namen bezeichnet werden und die IUPAC-Regeln in vielen Fällen ebenfalls mehr als einen systematischen Namen zulassen. Einige traditionelle Bezeichnungen (z.B. Styren, Harnstoff) werden auch für die systematischen Nomenklatur herangezogen. Die neue Auflage des *Blue Book*⁵ hierarchisiert die Kriterien, mittels derer eine für regulatorische Anwendungen zu bevorzugende IUPAC-Bezeichnung ([Preferred IUPAC Name](#), PIN) auszuwählen ist.

2 SUBSTITUTIVE NOMENKLATUR

Die **substitutive Nomenklatur** ist die wichtigste Methode zur Benennung von organisch-chemischen Verbindungen. Sie wird hauptsächlich für Verbindungen verwendet, die aus Kohlenstoff oder Elementen der Gruppen 13-17 bestehen. Um eine Verbindung zu benennen, wird sie als eine Kombination aus einer Stammverbindung (Abschnitt 5) und charakteristischen (funktionellen) Gruppen betrachtet, von denen eine als ranghöchste charakteristische Gruppe ausgewählt wird (Abschnitt 4). Eine systematische Bezeichnung basiert auf dem Namen der am höchsten priorisierten Stammverbindung (Abschnitt 6), wobei die Substitution von Wasserstoffatomen mittels Suffixes für die charakteristische(n) Hauptgruppe(n) dargestellt wird, während Präfixe für weniger hoch priorisierte funktionelle Gruppe und andere Substituenten verwendet werden, sowie Lokanten, die deren jeweilige Position angeben. Bezeichnungen, die gemäß den Regeln der substitutiven Nomenklatur erstellt worden sind, können auch Substituenten enthalten, die gemäß anderer Nomenklaturtypen oder –Operationen benannt worden sind. Beispielsweise wird der Sättigungsgrad üblicherweise mittels additiver und subtraktiver Nomenklaturoperationen (Abschnitt 5.4) definiert, während Heteroatome, die (in den meisten Fällen) Kohlenstoffatome ersetzen, mittels Austauschoperation bezeichnet werden.

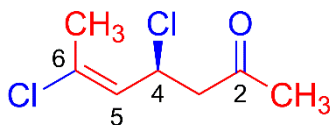
2.1 Bestandteile einer systematisch-substitutiven Bezeichnung

In Tabelle 1 sind unter Bezugnahme auf die systematische Bezeichnung, den entsprechenden strukturellen Merkmalen und der Strukturformel die gebräuchlichsten Bestandteile gezeigt, die kombiniert werden, um eine substitutive, chemische Bezeichnung zu bilden.

Lokanten geben die Position von Substituenten oder Teilstrukturen an. Sie stehen in der Regel vor dem strukturellen Merkmal, auf das sie sich beziehen. Falls angegeben werden muss, welche Teile der Bezeichnung zusammengehören, können drei Arten von Klammern in folgender Reihenfolge verwendet werden: {[()]}.

Tabelle 1: Bestandteile einer substitutiven Bezeichnung

(4*S*,5*E*)-4,6-Dichlorhept-5-en-2-on für



hept(a)	Stamm (Heptan)	on	Suffix der funktionellen Hauptgruppe
en	Sättigungsgrad	Chlor	Präfix des Substituenten
di	vervielfachendes Präfix	S E	Stereodeskriptoren
2 4 5 6	Lokanten	()	Klammern

Wenn im Molekül mehrere identische Substituenten auftreten, werden sie mit vervielfachenden (Syn.: multiplikativen) Präfixen bezeichnet (Tabelle 2). Welches vervielfachenden Präfix im Einzelnen verwendet wird, hängt von der Komplexität der Gruppe ab – z.B. Trichlor-, aber Tris(Chlormethyl).

Tabelle 2: Vervielfachende Präfixe für einfache/komplexe Komponenten

Nr.	Einfach	Komplex	Nr.	Einfach	Komplex
2	di	bis	8	octa	octakis
3	tri	tris	9	nona	nonakis
4	tetra	tetrakis	10	deca	decakis
5	penta	pentakis	11	undeca	undecakis
6	hexa	hexakis	12	dodeca	dodecakis
7	hepta	heptakis	20	icosa	icosakis

3 SYSTEMATISCHE BEZEICHNUNGEN BILDEN

Um eine Verbindung systematisch zu benennen, müssen gegebenenfalls mehrere aufeinander folgende Schritte durchgeführt werden. Die Reihenfolge der notwendigen Schritte ist wie folgt:

- Am höchsten priorisierte funktionelle Gruppe bestimmen, die als Suffix angegeben wird (Abschnitt 4)
- Stammverbindung mit höchster Priorität bestimmen, welche die funktionelle Gruppe mit der höchsten Priorität trägt (s. Abschnitte 5 und 6)
- Stammhydrid benennen und ungesättigte Positionen spezifizieren (Abschnitt 5)
- Namen des Stammhydrids mit dem Suffix der ranghöchsten funktionellen Gruppe kombinieren (Abschnitt 4)

- e. Substituenten bestimmen und die entsprechenden Präfixe alphabetisch ordnen
- f. Vervielfachende Präfixe einfügen, ohne die bisher erstellte Reihenfolge zu ändern, und Lokanten ergänzen
- g. Chiralitätszentren und andere stereogene Gruppen wie Doppelbindungen bestimmen und Stereodeskriptoren ergänzen

4 FUNKTIONELLE GRUPPEN – SUFFIXE UND PRÄFIXE

Sind charakteristische (oder funktionelle) Gruppe vorhanden, wird die Bezeichnung des Stammsystems um ein entsprechendes Präfix oder Suffix ergänzt. Die Namen häufiger funktioneller Gruppen sind in Tabelle 3 nach abnehmender Priorität aufgelistet. Die funktionelle Gruppe mit höchster Priorität wird mittels Suffixes bezeichnet, während alle anderen funktionellen Gruppen mittels Präfixen angegeben werden. Es sollte beachtet werden, dass C-C-Mehrfachbindungen im nomenklatorischen Sinne keine funktionellen Gruppen sind (Abschnitt 5.4).

Tabelle 3: Reihenfolge der Priorität funktioneller Gruppen

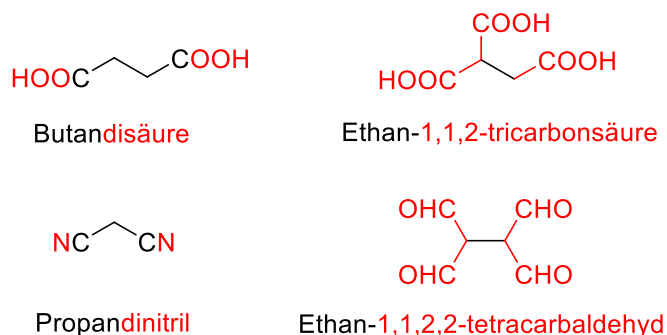
Klasse	Formel*	Suffix	Präfix
Carboxylate	-COO ⁻ -(C)OO-	carboxylat oat	Carboxylato
Carbonsäuren	-COOH -(C)OOH	carbonsäure säure	Carboxy
Carbonsäureester	-COOR -(C)OOR	(R)...carboxylat** (R)...oat**	(R)oxycarbonyl
Carbonsäurehalogenide	-COX -(C)OX	carbonylhalogenid oylhalogenid	Halogencarbonyl
Carbonsäureamide	-CONH ₂ -(C)ONH ₂	carbamid amid	Carbamoyl
Nitrile	-C≡N -(C)≡N	carbonitril nitril	Cyan
Aldehyde	-CHO -(C)HO	carbaldehyd al	Formyl Oxo
Ketone	=O	on	Oxo
Alkohole	-OH	ol	Hydroxy
Thiole	-SH	thiol	Sulfanyl***
Amine	-NH ₂	amin	Amino
Imine	=NH	imin	Imino

*-(C) bedeutet hier, dass das Kohlenstoffatom durch den Namen der Stammverbindung vorgegeben wird.

** (R) bedeutet hier, dass die Gruppe R gesondert als Präfix angegeben wird.

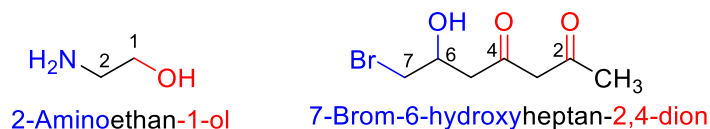
***Bitte beachten Sie, dass die Bezeichnung „Mercapto-“, nicht länger akzeptiert ist (aber immer noch von der CAS verwendet wird).

Entsprechend der Anzahl und Anordnung der enthaltenen Kohlenstoffatome in der funktionellen Gruppe, die als Suffix angegeben wird, kann das Kohlenstoffatom auch Teil des Stammsystems sein (z.B. $-(C)OOH$, „-säure“) oder als Anhängsel des Stammsystems betrachtet werden (z.B. $-COOH$, „-carbonsäure“).



Weitere funktionelle Gruppen des Stammsystems werden in alphabetischer Reihenfolge mittels der entsprechenden Präfixe angegeben (hier **in Blau**, wobei R für eine Alkyl- oder Arylgruppe steht), inklusive Ethern ($-OR$), **(R)oxy**; Sulfiden ($-SR$), **(R)sulfanyl**; $-Br$, **Brom**, $-Cl$, **Chlor**, $-F$, **Fluor**, I , **Iod**; und $-NO_2$, **Nitro**.

Anmerkung: Im englischen Sprachgebrauch werden die Präfixe der Halogene mit einem endständigen $-o$ angegeben: bromo, chloro, fluoro, iodo.



5 STAMMSYSTEME UND -HYDRIDE

In der substitutiven Nomenklatur werden verschiedene Arten von Stammsystemen verwendet. Stammsysteme ohne funktionelle Gruppen werden als Stammhydride bezeichnet. Diese können in Ketten- oder Ringsysteme unterteilt werden, die Kohlenstoff- und/oder Heteroatome enthalten können. Die Ringsysteme können monozyklisch, verbrückt polyzyklisch (Ringe sind über mehr als eine gemeinsame Bindung verbunden), anelliert (Ringe sind über genau eine gemeinsame Bindung verbunden) oder eine Spiroverbindung (Ringe über genau ein Atom verbunden) sein. Verbrückt anellierte Polyzyklen, Ringverbände, Cyclophane und Fullerene zählen zu den komplexeren Stammsystemen. Die Nummerierung der Atome des Stammsystems erfolgt gemäß den Vorgaben für den jeweiligen Typ des Stammsystems. Entsprechend anzuwendende Regeln sind in Abschnitt 7 zusammengefasst.

5.1 Azyklische (kettenförmige) Stammhydride

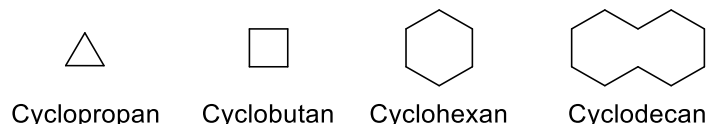
Die Bezeichnungen für gesättigte Kohlenstoffketten (Alkane) setzen sich aus einer Bezeichnung für die Anzahl der Kohlenstoffatome (Tabelle 2 ohne das „a“) und der Endung „-an“ (s. Tabelle 4) zusammen. Eine Ausnahme bilden die ersten vier Alkane: Methan, CH_4 ; Ethan, CH_3CH_3 ; Propan, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ und Butan, $\text{CH}_3[\text{CH}_2]_2\text{CH}_3$.

Tabelle 4: Bezeichnungen ausgewählter linearer Alkane

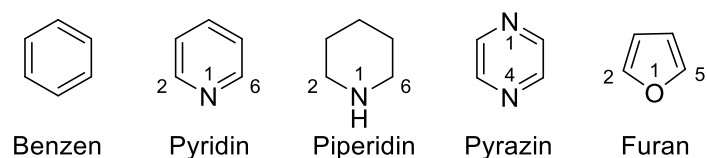
$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_3\text{CH}_3$	$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_7\text{CH}_3$	$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_{18}\text{CH}_3$
Pentan	Nonan	Icosan
$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_4\text{CH}_3$	$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_{16}\text{CH}_3$	$\text{CH}_3[\text{CH}_2]_{20}\text{CH}_3$
Hexan	Octadecan	Docosan

5.2 Monozyklische Stammhydride

Die Bezeichnungen gesättigter, kohlenstoffhaltiger Monozyklen (Zykloalkanen) setzen sich aus dem Präfix „Cyclo-“ und der Bezeichnung des jeweiligen Alkans zusammen.



Daneben gibt es eine Reihe nicht-systematischer Bezeichnungen für gebräuchliche Ringe wie z.B. Benzen und die nachfolgenden Heterozyklen.



Monozyklen, die Heteroatome enthalten, werden systematisch entweder nach dem Hantzsch-Widman- (H-W-)System (3- bis 10-gliedrige Ringe) oder der Austauschnomenklatur (größere Ringe) bezeichnet. Beide Systeme verwenden „a“-Terme. Die „a“-Terme sind in Tabelle 5 von links nach rechts über zwei Zeilen mit abnehmender Priorität angeordnet.

Anmerkung: Im Englischen werden die a-Terme „a prefixes“ genannt.

Tabelle 5: Ausgewählte „a“-Terme des H-W- und Austauschsystems

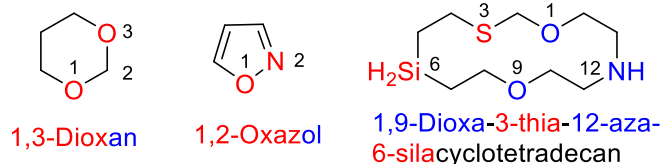
O	Oxa	S	Thia	N	Aza	P	Phospha
As	Arsa	Si	Sila	Sn	Stanna	B	Bora

Das H-W-System kombiniert die „a“-Terme (Tabelle 5) nach abnehmender Priorität mit Endungen – im H-W-System Stamm genannt – die Rückschluss auf Ringgröße und – sättigung geben (Tabelle 6). Lokanten beschreiben die Position, an der ein Heteroatom im Ring ein Kohlenstoffatom ersetzt, und das „a“ des Terms wird gestrichen, wenn ein Vokal folgt. Falls mehr als 10 Atome im Ring vorkommen, wird die Austauschnomenklatur verwendet, in der ebenfalls „a“-Terme in abnehmender Priorität und Lokanten vor dem Stammsystem verwendet werden. Die Nummerierung der Atome wird in Abschnitt 7 erläutert.

Tabelle 6: Stammnamen des Hantzsch-Widman-Systems

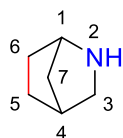
Ringglieder	Ungesättigt	Gesättigt
3	irin*/iren	iridin/iran**
4	et	etidin/etan**
5	ol	olidin/olan**
6	in/in/inin	an/inan/inan***
7	epin	epan

*Für Ringe, die ausschließlich N-Heteroatom(e) enthalten; **Für Ringe, die entweder N-Heteroatom(e) enthalten oder nicht; ***Wenn O,S / N,Si,Sn / P,As,B als letztes Heteroatom bezeichnet werden.

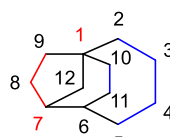


5.3 Polyzyklische Stammhydride

Die Bezeichnung von **verbrückten polyzyklischen Systemen** basiert auf der Bezeichnung des Alkans mit derselben Anzahl Kohlenstoffatomen, der ein Indikator, der die Anzahl der vorhandenen Zyklen beschreibt, und ein Deskriptor, der die Größe der verschiedenen Ringe angibt, vorausgehen. Der Deskriptor gibt die Anzahl der Gerüst-atome in den Brücken an, die die Brückenköpfe miteinander verbinden, und wird mittels arabischer Zahl(en) in absteigender Wertigkeit in eckigen Klammern angegeben, wobei die Zahlen mittels Punkt voneinander getrennt werden. Die Nummerierung beginnt am Brückenkopf und geht dann nacheinander die Ringe ab (vom größten zum kleinsten). Verwandte Heterozyklen werden mittels Austauschnomenklatur (Abschnitt 5.2) bezeichnet.

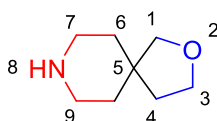


2-Azabicyclo[2.2.1]heptan

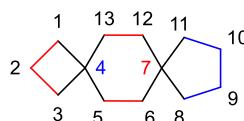


Tricyclo[4.3.2.1^{1,7}]dodecan

Die Bezeichnungen von **polyzyklischen Spiroverbindungen**, in denen sich die einzelnen Ringe ein einzelnes Atom teilen, geben die Anzahl von Spiroverknüpfungen, einen Brückendeskriptor und den Namen des Alkans an, das dieselbe Anzahl an Kohlenstoffatomen enthält. Verwandte Heterozyklen werden mittels Austauschnomenklatur (Abschnitt 5.2) bezeichnet.

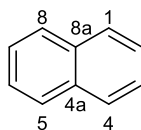


2-Oxa-8-azaspiro[4.5]decan

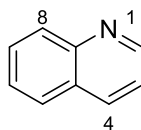


Dispiro[3.2.4⁷.2⁴]tridecan

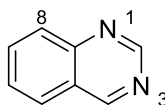
Anellierte Polyzyklen sind zyklische Systeme, in denen benachbarte Ringe jeweils eine gemeinsame Bindung teilen.



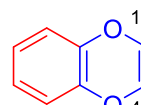
Naphtalen



Chinolin

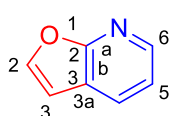


Chinazolin

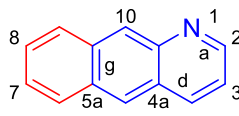


1,4-Benzodioxin

Um anellierte Polyzyklen systematisch zu benennen, werden die Namen der Einzelteile kombiniert; ein Kondensationsdeskriptor gibt an, wie die Unterstrukturen miteinander verbunden sind. Dieses Verfahren geht allerdings über den Umfang dieses Leitfadens hinaus (s. Quelle 5 für detaillierte Ausführungen).



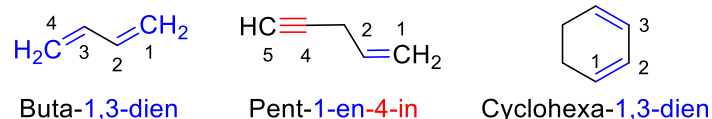
Furo[2,3-*b*]pyridin



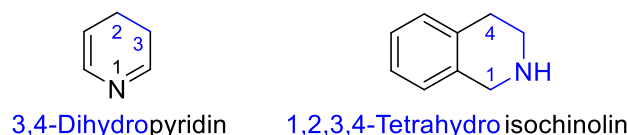
Benzo[*g*]chinolin

5.4 Sättigungsgrad

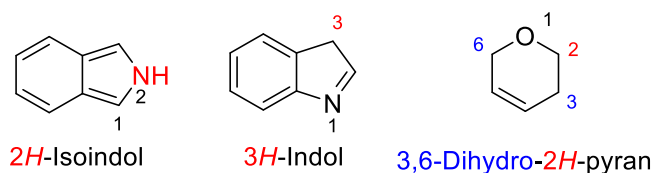
Treten im Vergleich zum gesättigten Stammsystem des zu benennenden Moleküls Doppel- oder Dreifachbindungen auf, wird die Endung „-an“ durch „-en“ oder „-in“ ersetzt, wobei Lokanten verwendet werden, um deren Position zu spezifizieren.



Ist im Vergleich zum Stammsystem Wasserstoff addiert worden, kann durch Zusatz des Präfix „Hydro-“, angegeben werden, dass Doppelbindungen gesättigt sind. Auch in diesem Fall wird mittels Lokanten spezifiziert, welche Positionen betroffen sind.

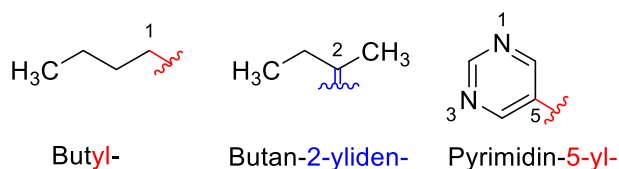


Einige ungesättigte Stammhydride werden benannt, indem die Konvention des *indizierten Wasserstoffs* verwendet wird, um die gesättigten Positionen zu bezeichnen.



5.5 Substituentengruppen, die von Stammhydriden abgeleitet sind

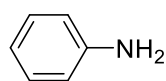
In Fällen, in denen eine von einem Stammhydride abgeleitete Gruppe Substituent einer Stammverbindung ist, wird der Substituent bezeichnet, indem die Suffixe „-yl“ oder „-yliden“ an die Bezeichnung des Stammhydride angehängt werden. Eine Lokante spezifiziert die entsprechende Position, an der der Substituent sitzt. Die mittels „-yl“ oder „-yliden“ bezeichneten Bindungspositionen sind allen funktionellen Gruppen überzuordnen (s. Abschnitt 4, Tabelle 3).



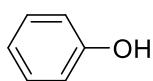
5.6 Stammverbindungen

Als Stammverbindung bezeichnet man eine Verbindung, in der ein Stammhydrid mit einer funktionellen Gruppe verbunden ist. Diese Bezeichnungen werden zur systematischen Benennung nur verwendet, wenn sie das Stammsystem und die funktionelle Gruppe mit der höchsten Priorität der betrachteten Verbindung

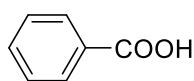
ausdrücken, z.B. 4-Chloranilin, aber 4-Aminobenzoessäure (nicht 4-Carboxyanilin oder Anilin-4-carbonsäure).



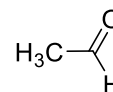
Anilin



Phenol



Benzoessäure

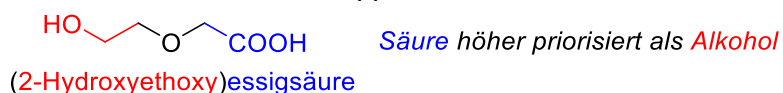


Acetaldehyd

6 PRIORISIERUNG DER STAMMVERBINDUNGEN

Die systematische Bezeichnung basiert auf der Stammverbindung mit der höchsten Priorität, die gemäß dem folgenden Vorgehen bzw. dem in Abbildung 1 gezeigten Schema bestimmt wird. Dabei werden die Kriterien betrachtet, bis eine Entscheidung getroffen werden kann. Literaturstelle 8 bietet einen vollständigen Überblick über die anzuwendenden Kriterien. Im nachfolgenden Beispiel wird die Stammverbindung mit der höchsten Priorität in Blau dargestellt und die Begründung wird nebenstehend angegeben.

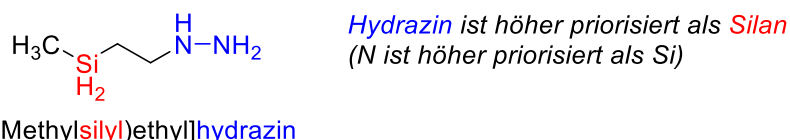
- a. Enthält die funktionelle Gruppe mit der höchsten Priorität



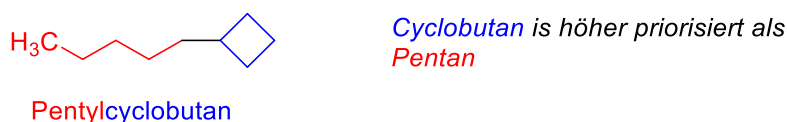
- b. Enthält die meisten Vertreter der funktionellen Gruppe mit der höchsten Priorität



- c. Die Stammverbindung besteht aus dem Element mit höherer Priorität



- d. Ringe sind höher priorisiert als Ketten, wenn sie aus demselben Element bestehen

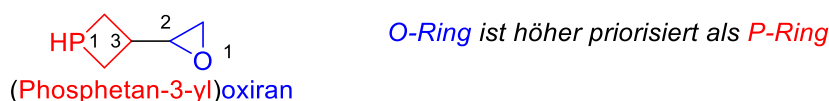


Anmerkung 1: Nach diesem Kriterium verbleiben entweder nur Ringsysteme oder nur Ketten zur weiteren Entscheidung.

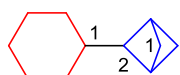
Anmerkung 2: Frühere Empfehlungen ermittelten die Prioritäten basierend auf der Anzahl der Atome.

- e. Kriterien für Ringsysteme

e.1. Enthält das Heteroatom mit der höchsten Priorität in folgender Reihenfolge:
N, O, S, P, Si, B.



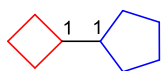
e.2. Enthält mehr Ringe



Bicyklus ist höher priorisiert als Monozyklus

2-Cyclohexylbicyclo[1.1.1]pentan

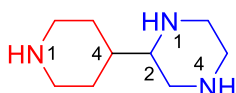
e.3. Enthält mehr Atome



Cyclopentan ist höher priorisiert als Cyclobutan

Cyclobutylcyclopentan

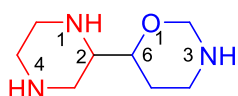
e.4. Enthält mehr Heteroatome



Piperazin ist mit zwei Heteroatomen höher priorisiert als Piperidin

2-(Piperidin-4-yl)piperazin

e.5. Enthält mehr Heteroatome mit höherer Priorität

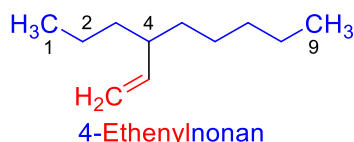


Oxazinan mit O und N ist höher priorisiert als Piperazin mit zwei N-Atomen

6-(Piperazin-2-yl)-1,3-oxazinan

f. Kriterien für Ketten

f.1. Enthält mehr Atome

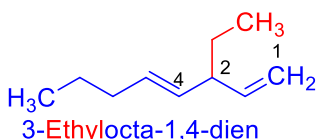


Kette aus neun Atomen ist höher priorisiert als Kette aus acht Atomen (selbst wenn es weniger Doppelbindungen hat)

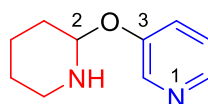
Anmerkung: In früheren Empfehlungen wurde der Sättigungsgrad höher als die Kettenlänge priorisiert.

Die nachfolgenden Kriterien werden sowohl auf Ringsysteme als auch auf Ketten angewendet:

g. Enthält mehr Mehrfach-, gefolgt von Doppelbindungen

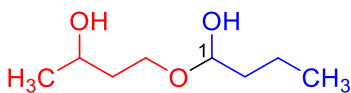


3-Ethylocta-1,4-dien



3-[(Piperidin-2-yl)oxy]pyridin

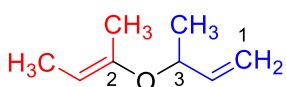
h. Benötigt weniger Lokanten zur Benennung der funktionellen Gruppe mit höchster Priorität



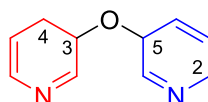
1-(3-Hydroxybutoxy)butan-1-ol

Butan-1-ol ist höher priorisiert als Butan-2-ol

i. Benötigt weniger Lokanten für die Angabe von ungesättigten Bindungen oder Hydro-Präfixen

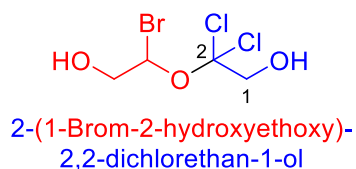


3-[(But-2-en-2-yl)oxy]but-1-en



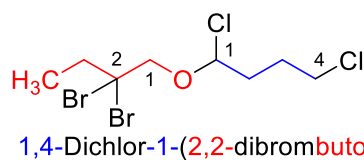
5-[(3,4-Dihydropyridin-3-yl)oxy]-2,5-dihydropyridin

j. Höchste Anzahl an Substituenten



*Stamm mit drei Substituenten ist höher
priorisiert als Stamm mit zwei
Substituenten*

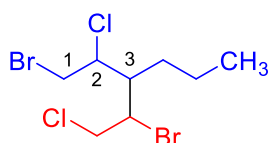
- k. Niedrigste Anzahl an Lokanten für die Substituenten



*Lokanten aller Stammverbindungen werden
in aufsteigender Reihenfolge geordnet und
eine nach der anderen verglichen:
1,1,4 ist niedriger als 1,2,2*

Anmerkung: Nicht 2,2-Dibrom-1-(1,4-dichlorbutoxy)butan

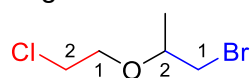
- l. Niedrigste Werte der Lokanten in Reihenfolge der Bezeichnung



1,3,2 ist niedriger als 2,3,1

Anmerkung: Nicht 2-Brom-3-(2-brom-1-chlorethyl)-1-chlorhexan

- m. Angabe der Namen in alphabetischer Reihenfolge



Anmerkung: Nicht 1-(2-Bromethoxy)-2-chlorethan

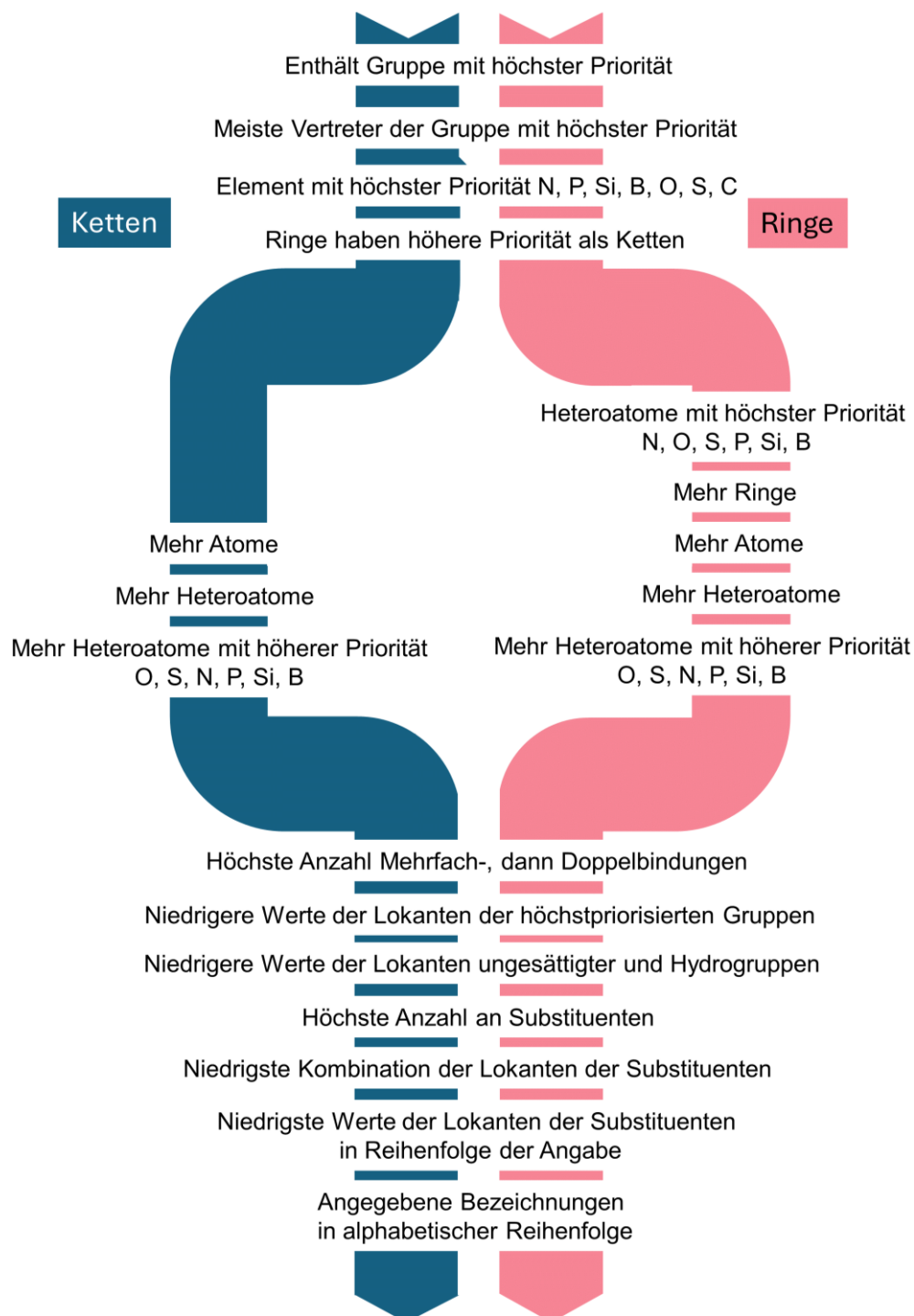


Abbildung 1: Kriterien, um die Stammverbindung mit höchster Priorität auszuwählen

7 NUMMERIERUNG DER STAMMVERBINDUNGEN

Gemäß der Stoffklasse der Stammverbindung wird die Nummerierung der Stammverbindung bestimmt. Zusätzlich werden alle Möglichkeiten, Lokanten anzugeben, berücksichtigt und die nachfolgenden Kriterien in der angegebenen Reihenfolge angewendet:

- Niedrigste Lokanten für Heteroatome

- b. Niedrigste Lokante(n) für den indizierten Wasserstoff
- c. Niedrigste Lokante(n) für funktionelle Gruppen mit höchster Priorität
- d. Niedrigste Lokanten für „-en“, „-yn“ und Hydropräfixe
- e. Niedrigste Lokanten als Gesamtheit aller Substituenten, die als Präfixe angegeben werden
- f. Niedrigste Lokanten in der Reihenfolge ihrer Angabe

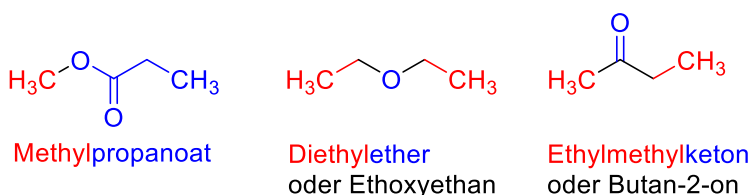


Die korrekte Nummerierung ist von höchster Bedeutung, weil bereits ein falsch angegebener Lokant es dem Leser unmöglich macht, aus der Bezeichnung die korrekte Struktur abzuleiten.

8 Radikofunktionelle Nomenklatur

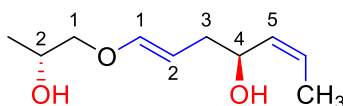
Die radikofunktionelle Nomenklatur (engl. functional class names) wird für Ester und Säurehalogenide bevorzugt. Für andere Stoffklassen (z.B. Ether, Ketone, Sulfoxide und Sulfone) sind radikofunktionelle Bezeichnungen noch gebräuchlich, allerdings sind die substitutiv gebildeten Namen zu bevorzugen.

Radikofunktionelle Bezeichnungen bestehen aus dem Namen eines oder mehreren Substituenten in alphabetischer Reihenfolge, auf die der Name der Stoffklasse folgt (nach Bedarf durch Bindestriche getrennt). Entsprechend wird $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{CH}_3$ als Methylacetat, $\text{ClCH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}-\text{CH}_3$ als Methylchloracetat, $\text{CH}_2\text{C}(\text{O})-\text{Cl}$ als Acetylchlorid, $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}(\text{O})-\text{Br}$ als Benzoylbromid und $(\text{H}_3\text{C})_2\text{SO}_2$ Dimethylsulfon bezeichnet.



9 Angabe der Konfiguration von Stereoisomeren

Stereoisomere werden voneinander durch Stereodeskriptoren unterschieden, die im Namen angegeben und gemäß den Regeln von Cahn-Ingold-Prelog (CIP) ermittelt werden.^{9,10} Die häufigsten Deskriptoren bezeichnen die absolute Konfiguration von tetraedrischen stereogenen Zentren (*R/S*) sowie für die Konfiguration von Doppelbindungen (*E/Z*). Lokanten werden verwendet, um die Position des stereogenen Zentrums zu beschreiben. Die Gesamtheit der Deskriptoren wird in runden Klammern angegeben.

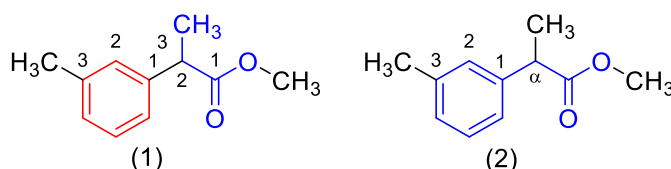


(1E,4S,5Z)-1-[(2R)-2-Hydroxypropoxy]hepta-1,5-dien-4-ol

Andere Stereodeskriptoren (z.B. *cis/trans*, *M/P*, *C/A*) werden in speziellen Fällen verwendet. Die nicht-kursiv geschriebenen Deskriptoren α/β und D/L (Kapitälchen) werden üblicherweise - und ausschließlich - für Naturstoffe, Aminosäuren und Kohlenhydrate verwendet.

10 CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE (CAS) BEZEICHNUNGEN

Der CAS unterhält eine Datenbank (CAS-Registry) chemischer Substanzen aus Publikationen.¹¹ Im CAS-System werden Substanzen nach ähnlichen, aber nicht mit den IUPAC-Empfehlungen identischen Regeln benannt. Der auffälligste Unterschied ist die Verwendung der „CA Index Names“, die im Verzeichnis in einer speziellen, umgekehrten Reihenfolge zitiert werden, die für die Erstellung alphabetischer Verzeichnisse von chemischen Namen entwickelt wurde. Der CAS verwendet konjunktive Nomenklatur, für die Stammverbindungen kombiniert werden, um eine neue, größere Stammverbindung zu bilden. Im untenstehenden Beispiel lautet die Bezeichnung der konjunktiven Stammverbindung Benzolessigsäure (der entsprechende substitutive Name lautet Phenylelessigsäure), während die von der IUPAC empfohlene substitutive Benennung bei diesem Beispiel auf der längeren Kette der Stammverbindung Propansäure basiert.



IUPAC-Name: Methyl-2-(3-methylphenyl)propanoat (1)

CA-Name: methyl α ,3-dimethylbenzeneacetate (2)

Im Verzeichnis umgewandelt in: benzeneacetic acid, α ,3-dimethyl-, methylester

Anmerkung: Da es keine Übertragung der Chemical-Abstracts-Namen ins Deutsche gibt, wird an dieser Stelle auf eine Übersetzung verzichtet.

Weitere Unterschiede finden sich bei der Position der Lokanten und Stereodeskriptoren sowie einiger spezifischer Nomenklaturverfahren.

11 GRAPHISCHE DARSTELLUNG

Die Strukturformeln organisch-chemischer Verbindungen werden üblicherweise in Übereinstimmung mit der Zick-Zack-Schreibweise gezeichnet, die auch überwiegend in diesem Dokument verwendet worden ist.¹² Diese Schreibweise stellt alle Kohlenstoffatome (und ihre gebundenen Wasserstoffatome), die an mindestens zwei weitere Atome gebunden sind, durch den Schnittpunkt zweier Linien dar, welche die Bindungen repräsentieren.

Wasserstoffatome, die an Heteroatome gebunden sind, dürfen nicht weggelassen werden. Jedes Linienende, jeder Winkel und jeder Schnittpunkt steht in dieser Schreibweise für ein mit Wasserstoff gesättigtes Kohlenstoffatom. Spezielle Konventionen werden verwendet, um die Konfiguration von stereogenen Zentren und Doppelbindungen darzustellen.¹³

To cite, please use: IUPAC, Pure Appl. Chem. 2020, <https://doi.org/10.1515/pac-2019-0104>. Publication of this document by any means is permitted on condition that it is whole and unchanged. Copyright © IUPAC and De Gruyter 2020.

¹frei verfügbar auf (a) <https://www.degruyter.com/view/i/pac>; (b) <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/>.

²R. M. Hartshorn et al., Brief Guide to the Nomenclature of Inorganic Chemistry, [Pure Appl. Chem. 87\(9-10\), 1039-1049 \(2015\)](#).

³R. C. Hiorns et al., A Brief Guide to Polymer Nomenclature, [Pure Appl. Chem. 84\(10\), 2167-2169 \(2012\)](#).

⁴[Principles of Chemical Nomenclature – A Guide to IUPAC Recommendations, 2011 Edition](#), G. J. Leigh (Ed.), RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-1-84973-007-5.

⁵[Nomenclature of Organic Chemistry – IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013](#), H. A. Favre, W. H. Powell (Eds.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-182-4; errata: <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BErrors.thml>.

⁶[Nomenclature of Inorganic Chemistry – IUPAC Recommendations 2005](#), N. G. Connolly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton (Eds.), RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 0-85404-438-8.

⁷[Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature – IUPAC Recommendations 2008](#), R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama, W. V. Metanovski (Eds.), RSC Publishing, Cambridge, U.K., ISBN 978-0-85404-491-7.

⁸Section P-52 in reference 5.

⁹R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, Specification of Molecular Chirality, [Angew. Chem. 78, 413-447 \(1966\)](#); [Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 5, 385-415 and 511 \(1966\)](#).

¹⁰V. Prelog; G. Helmchen, Basic Principles of the CIP-System and Proposals for a Revision, [Angew. Chem. 94, 614-631 \(1982\)](#); [Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 21, 567-583 \(1982\)](#).

¹¹ Chemical Abstract Service, <https://www.cas.org>

¹² J. Brecher et al., Graphical representation of stereochemical configuration, [Pure Appl. Chem. 78\(10\), 1897-1970 \(2006\)](#).

¹³ J. Brecher *et al.*, Graphical representation of stereochemical configuration, [Pure Appl. Chem. 78\(10\), 1897-1970 \(2006\)](#).