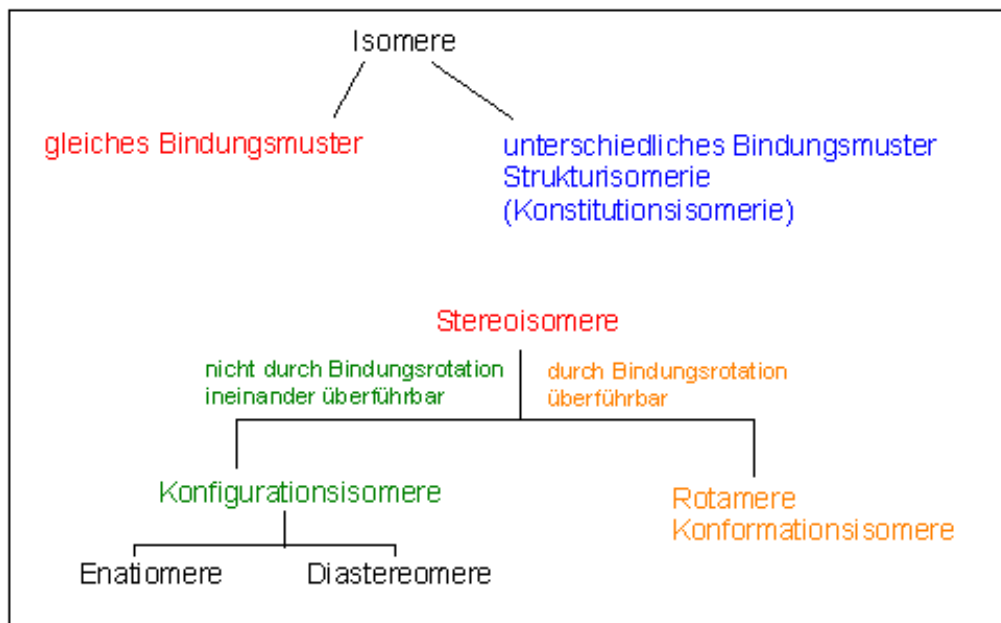


Nomenklatur organischer Verbindungen

In der folgenden Abbildung ist eine Übersicht über die verschiedenen Formen der Isomerie gegeben:



Isomere sind Verbindungen gleicher Summenformel aber mit unterschiedlicher Gestalt. Man unterscheidet zwischen **Konstitutionsisomeren** (Isomere mit unterschiedlicher Konnektivität, welche nur durch Bindungsbruch ineinander überführbar sind) und **Stereoisomeren** (Isomere mit gleichem Bindungsmuster aber unterschiedlicher räumlicher Anordnung).

Bei den **Stereoisomeren** unterscheidet man des weiteren zwischen **Konfigurationsisomeren**, zu denen die **Enantiomere** (verhalten sich wie Bild und Spiegelbild und sind nicht durch Drehung ineinander überführbar) und den **Diastereomeren** (verhalten sich nicht wie Bild und Spiegelbild, besitzen jedoch ein Chiralitätszentrum) gehören und den **Konformationsisomeren**, welche durch Bindungsrotation ineinander überführt werden können.

Im Folgenden soll die systematische Benennung von organischen Verbindungen nach IUPAC erläutert werden. In diesem Zusammenhang werden verschiedenste Beispiele zu den oben genannten Isomerieformen gegeben.

1.0 Nomenklatur der Alkane

Die systematische Nomenklatur aller organischen Verbindung basiert auf der Benennung der Alkane. Alkane sind gradkettige, gesättigte Kohlenwasserstoffe, welche keine funktionelle Gruppe aufweisen. Die Summenformel der Alkane folgt der allgemeinen Gleichung: C_nH_{2n+2} . In der folgenden Tabelle wird eine Übersicht über die homologe Reihe der Alkane und ihre systematischen Namen gegeben.

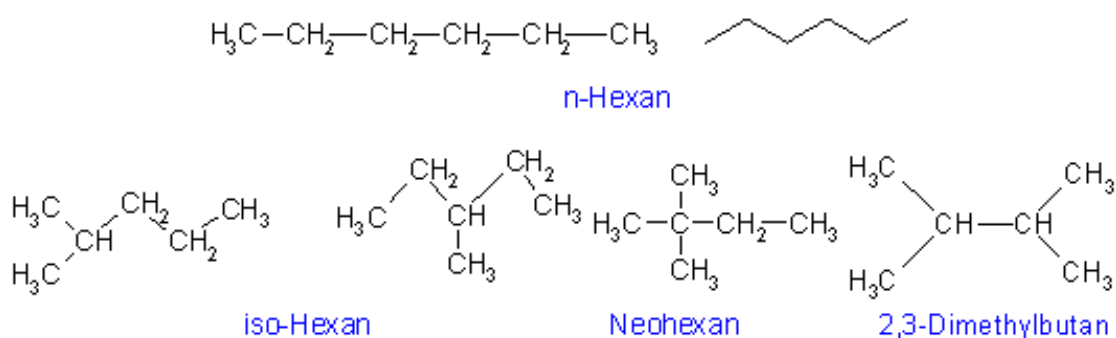
n	Name	Formel	Sdp. [°C]	Smp. [°C]	bei Raum- temperatur ein Gas
1	Methan	CH ₄	-161,7	-182,5	
2	Ethan	C ₂ H ₆	-88,6	-183,3	
3	Propan	H ₃ C-CH ₂ -CH ₃	-42,1	-187,7	
4	Butan	C ₄ H ₁₀	-0,5	-138,3	

5	Pentan	C ₅ H ₁₂	36,1	-129,8	bei RT flüssig
6	Hexan	C ₆ H ₁₄	68,7	-95,3	
7	Heptan	C ₇ H ₁₆			
8	Octan	C ₈ H ₁₈			
...					
18	Octadecan	H ₃ C(CH ₂) ₁₆ CH ₃	316,1	28,2	bei RT fest
19	Nonadecan	C ₁₉ H ₄₀	329,7	32,1	

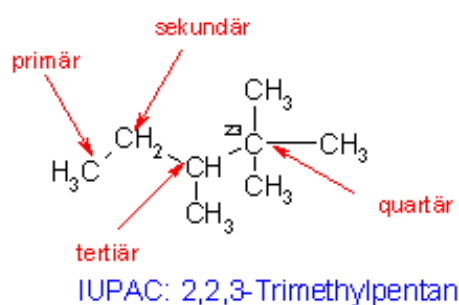
Bei den Alkanen tritt ab dem Butan eine Form der Isomerie auf. Diese wird als Konstitutionsisomerie bezeichnet. Die Folge dieser Isomerieform sind verzweigte Alkane.

Konstitutionsisomere: Isomere welche eine unterschiedliche Konnektivität aufweisen und nur durch Bindungsbruch ineinander überführbar sind.

Beispiele für diese Form der Isomerie sind das n-Hexan, iso-Hexan und das Neohexan sowie das 2,3-Dimethylbutan. Sie alle folgen der Summenformel C₆H₁₄. Somit sind sie alle Isomere des Hexans.



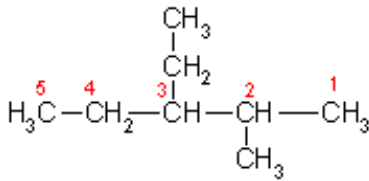
Wenn man sich die verschiedenen Isomere näher betrachtet stellt man fest, dass die Kohlenstoffatome unterschiedlich gebunden sind. Es gibt Kohlenstoffatome die an ein weiteres Kohlenstoffatom gebunden sind und welche die an zwei oder drei Kohlenstoffatome gebunden sind. Diese Kohlenstoffatome werden als primäre, sekundäre und tertiäre Kohlenstoffatome bezeichnet und es gibt sogar Verbindungen in denen sich quartäre Kohlenstoffatome finden lassen.



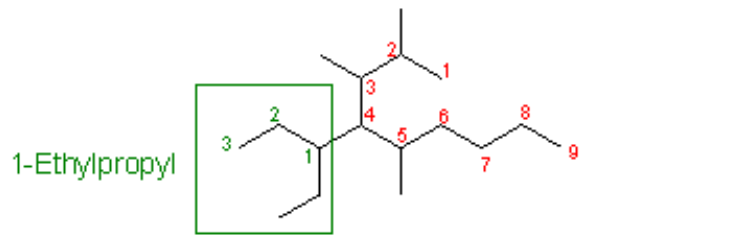
Es stellt sich nun die Frage wie derartige Verbindung systematisch zu benennen sind. Dazu wurde laut IUPAC die folgenden Regeln zur Benennung von verzweigten Alkanen aufgestellt.

Nomenklatur verzweigter Alkane

- Regel 1:** Benennen Sie die längste Kette von Kohlenstoffatomen im Molekül.
- Regel 2:** Benennen Sie die Substituenten an dieser Kette.
- Regel 3:** Nummerieren Sie die Kette von dem Ende, das einem Substituenten am nächsten ist.
- Regel 4:** Schreiben Sie den Namen des Alkans, indem Sie zunächst die Substituenten mit Anknüpfungspunkt in alphabetischer Reihenfolge angeben und dann den Namen des Stammalkans anhängen.

Beispiele:

3-Ethyl-2-methylpentan

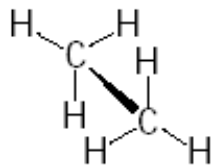


4-(1-Ethylpropyl)-2,3,5-trimethylnonan

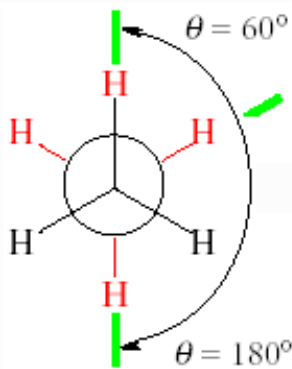
Sieht man sich nun die Alkane genauer an, so stellt man eine weitere Form der Isomerie fest - die **Konformationsisomerie**.

Konformationsisomere: Isomere welche die gleiche Konnektivität aufweisen, aber eine unterschiedliche räumliche Position besitzen. Sie lassen sich durch Rotation um Bindungsachsen ineinander überführen.

Diese soll im Folgenden anhand des Ethans erläutert werden. Beim Ethan ist eine freie Drehung um die Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindung möglich, so dass sich für die 2 mal drei Wasserstoffatome verschiedene Positionen zueinander ergeben.

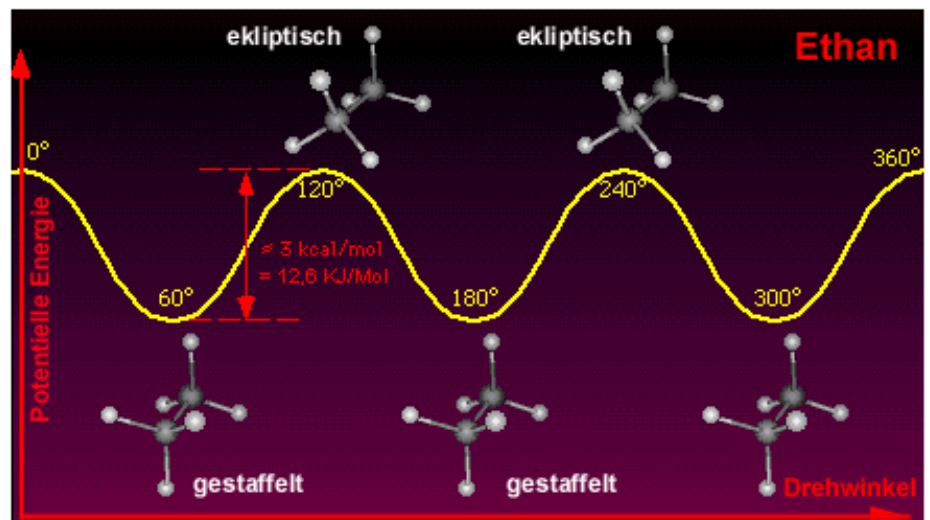
Ethan gestaffelt

Sägeblick



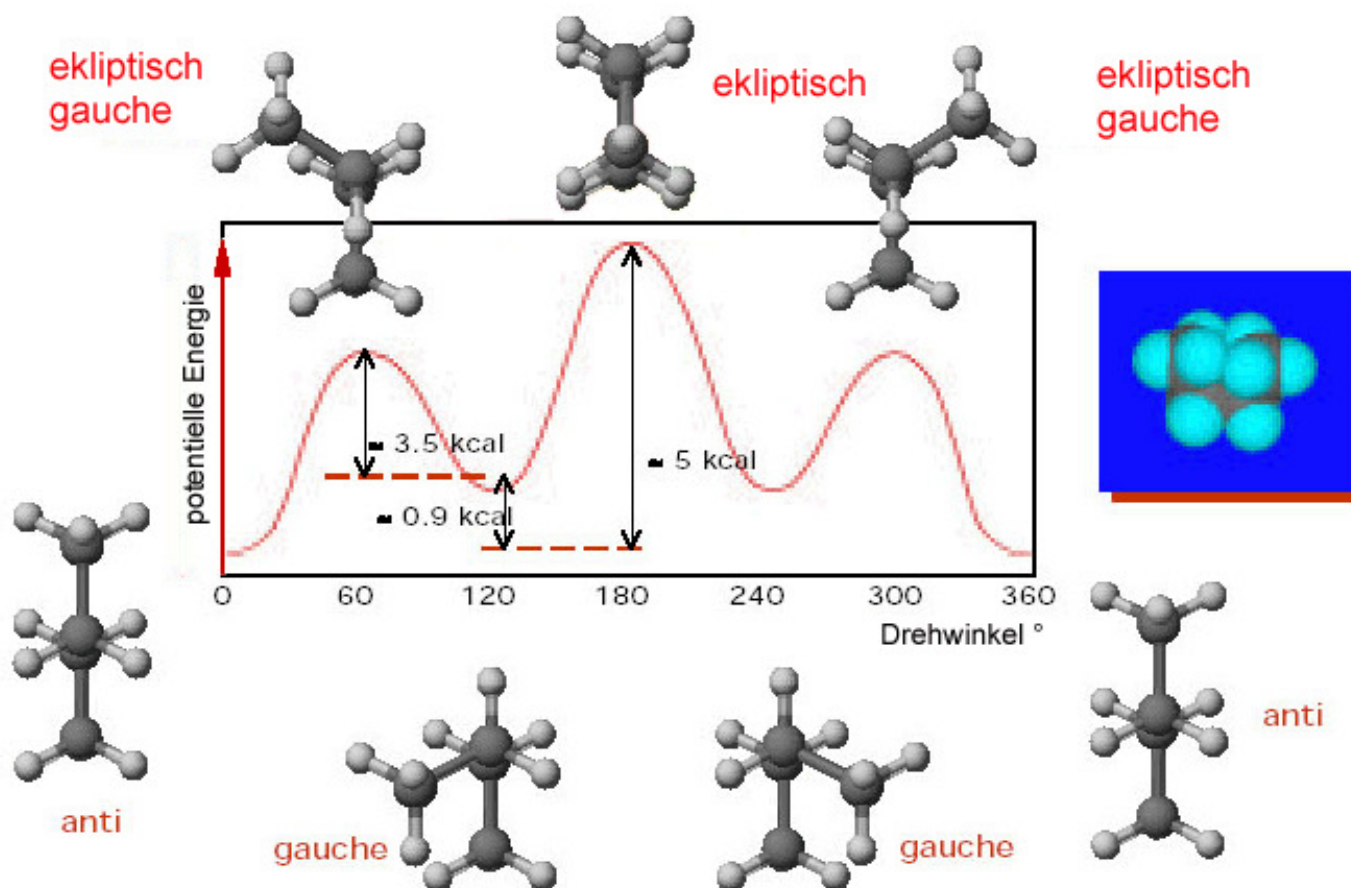
Newman-Projektion

Sieht man sich das Energie-Diagramm der Rotation um die Bindungsachse an, so stellt man fest, dass die gestaffelte Form des Ethans energetisch geringfügig günstiger ist, da dabei der Wasserstoff-Wasserstoffatom-Abstand am größten ist.



Sieht man sich die Rotation um die zentrale Bindung des n-Butans an, so stellt man ähnliches fest, wobei man hierbei zwischen weiteren energetisch unterschiedlichen Stellungen der Methylgruppen zueinander unterscheiden kann.

Konformationen des Butan



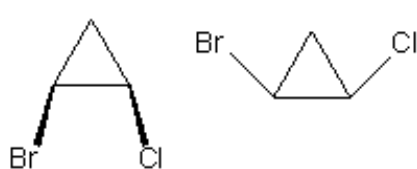
Organic Chemistry OnLine ©1999, 2000

1.1 Cycloalkane

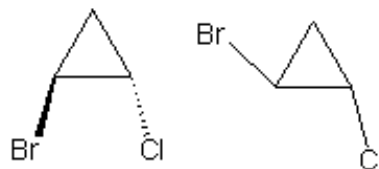
Neben den kettenartigen und verzweigten Alkanen können Alkane jedoch noch Ringe bilden. Man spricht bei ringförmigen Alkanen von Cycloalkanen. Die unterschiedlichen denkbaren Cycloalkane besitzen aufgrund ihrer verschiedenen Ringspannungen unterschiedliche Stabilität. Dabei stellt das Cyclopropan aufgrund seiner hohen Winkelspannung das instabilste Cycloalkan dar. Das Cyclohexan sowie das Cyclopentan besitzen geringe Ringspannungen und sind somit ziemlich stabil.

Bei den Cycloalkanen gibt es eine weitere Form der Isomerie. Man bezeichnet sie als **cis-trans-Isomerie** oder **(E)-(Z)-Isomerie**. Diese Form der Isomerie soll im Folgenden anhand des Cyclopropans erläutert werden. Die drei Kohlenstoffatome des Cyclopropans spannen eine Ebene auf. Betrachtet man das Molekül nun von dieser Ebene aus, so stellt man fest, dass sich drei Wasserstoffatome über dieser Ebene und drei weitere unter der Ebene befinden. Ersetzt man nun zwei der Wasserstoffatome gegen zwei Chloratome, so können diese beide auf einer Seite der Ebene liegen (cis- oder (Z)-Isomer) oder auf entgegengesetzten Seiten (trans- oder (E)-Isomer).

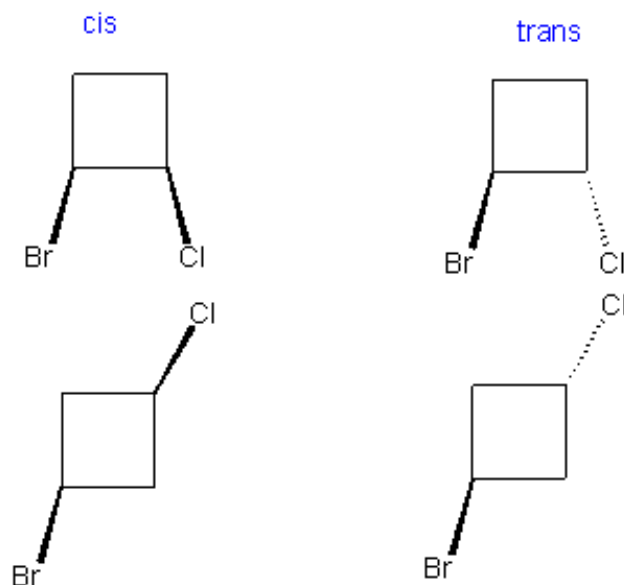
Beispiele:



cis: Substituenten auf gleicher Seite



trans: unterschiedliche Seiten



Diese Form der Isomerie gehört zur Konfigurationsisomerie.

Konfigurationsisomere: Gleiche Atomverknüpfung, aber unterschiedlicher räumlicher Aufbau.

Die Benennung der Cycloalkane erfolgt durch voranstellen der Bezeichnung Cyclo- vor den Stammnamen des betreffenden Alkans.

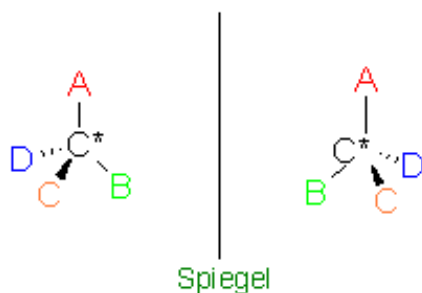
1.2 Chiralität

Eine weitere Form der Konfigurationsisomerie tritt bei den Enantiomeren auf. Enantiomere besitzen chirale Kohlenstoffatome, das heißt diese Kohlenstoffatome besitzen vier unterschiedliche Bindungspartner. Chirale Moleküle sind optisch aktiv und besitzen keine Symmetrieachse.

Chiralität: Verbindungen, die ein C-Atom mit 4 verschiedenen Substituenten besitzen, sind chiral. Sie können als 2 spiegelbildliche Isomere (*Enantiomere*) vorliegen.

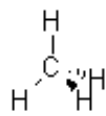
Ein 1:1-Gemisch der beiden Enantiomere wird *Racemat* beziehungsweise *racemisches Gemisch* genannt.

Bei dem asymmetrischen C-Atom handelt es sich um ein *Chiralitäts-* bzw. *Stereozentrum*.

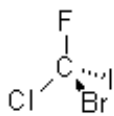


Verbindungen die sich wie Bild und Spiegelbild verhalten bezeichnet man dabei als Enantiomere. Moleküle mit einem asymmetrischen Kohlenstoffatom die sich nicht wie Bild und Spiegelbild zueinander verhalten werden als Diastereomere bezeichnet.

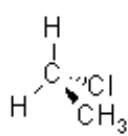
Im Folgenden werden einige Beispiele zu chiralen und achiralen Moleküle gegeben.



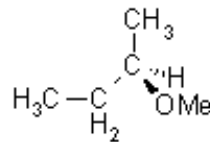
achiral



chiral



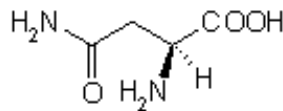
achiral



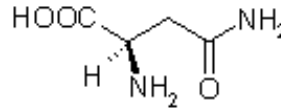
chiral

Ein Beispiel für eine bedeutende organische Verbindung mit einem asymmetrischen Kohlenstoffatom ist die Asparaginsäure.

Asparaginsäure



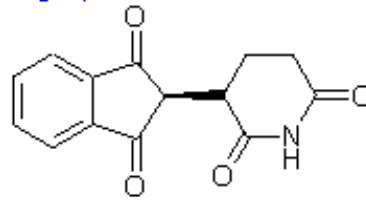
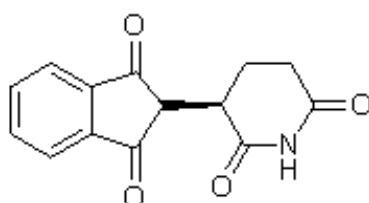
teratogen



beruhigend

In diesem Zusammenhang sei auch das zur traurigen Berühmtheit gekommene Contagan oder Thalidomid genannt.

Thalidomid (Contergan)



Bei chiralen Molekülen ist die räumliche Anordnung der Substituenten am asymmetrischen Kohlenstoff von Bedeutung und es stellt sich somit die Frage wie ein chirales Molekül eindeutig zu benennen ist.

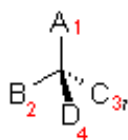
Um chirale Moleküle eindeutig benennen zu können verwendet man die CIP-Nomenklatur, welche auch als Cahn-Ingold-Prelog-Regel bekannt ist.

Cahn-Ingold-Prelog-Regel

CIP-Nomenklatur

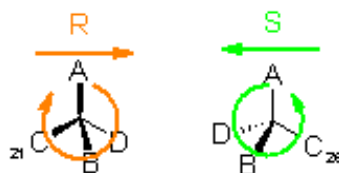
Benennung der absoluten Konfiguration

- Die Substituenten an einem asymmetrischen C-Atom wurden nach ihrer Priorität geordnet



Priorität
 $a > b > c > d$

- Der Substituent mit der niedrigsten Priorität wird nach hinten gezeichnet



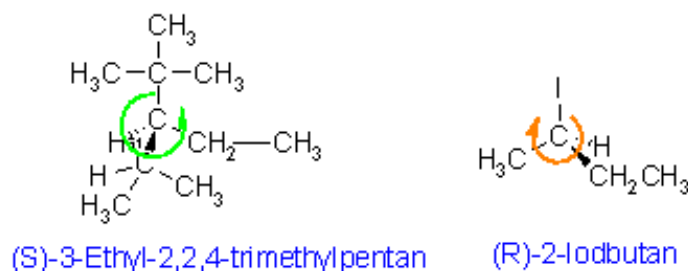
- Die Substituenten mit höchster Priorität geben eine Drehrichtung vor, die mit R oder S bezeichnet wird.

Um die Priorität der verschiedenen Substituenten festzulegen benötigt man die Sequenzenregel.

Die Priorität von Substituenten – Die Sequenzregel

- Regel 1: Die Atome an dem asymmetrischen C-Atom werden nach Prioritäten (Ordnungszahl) geordnet.
- Regel 2: Bei Atomen mit gleicher Ordnungszahl wird die weitere Kette betrachtet, bis es einen Unterschied in der Priorität gibt.
- Regel 3: Mehrfachbindungen werden wie mehrere gesättigte Verbindungen betrachtet.

Beispiele für die korrekte Nomenklatur von Chitralen Molekülen:

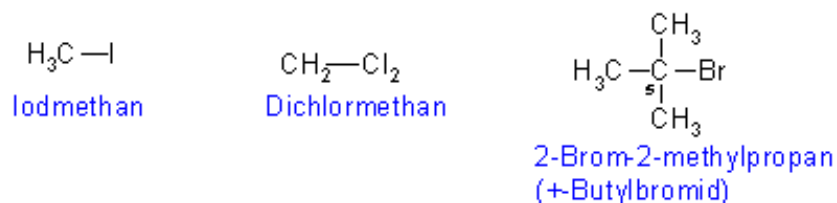


2.0 Benennung von Alkanen mit Substituenten

In den letzten Kapiteln wurden schon mehrfach Verbindungen als Beispiele angeführt, bei den ein Wasserstoffatom gegen ein anderes Atom oder eine andere Atomgruppierung ausgetauscht war. In diesem Kapitel soll nun die systematische Benennung von substituierten Alkanen erläutert werden.

2.1 Halogenalkanen

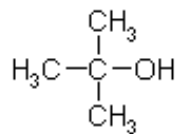
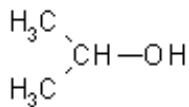
Bei den Halogenalkanen ist ein oder mehrere Wasserstoffatome gegen ein Halogenatom ausgetauscht. Derartige Verbindungen werden durch das Voranstellen des betreffenden Halogennamens vor den Stammnamen des Alkans benannt.



2.2 Alkohole und Thiole

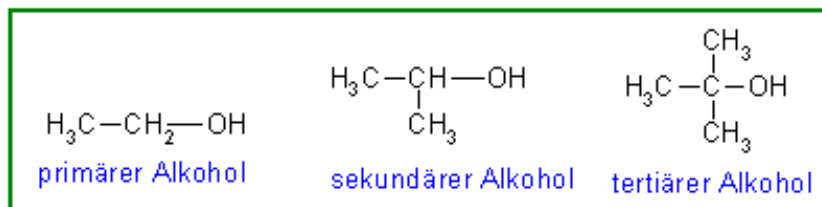
Alkohole sind Alkane bei denen ein oder mehrere Wasserstoffatome durch eine OH-Gruppierung ersetzt (bei Thiolen entsprechen durch eine SH-Gruppe). Die Nomenklatur erfolgt analog zu den Alkanen durch anhängen der Endung -ol.

Beispiele (der systematische Name nach IUPAC ist fett gedruckt):



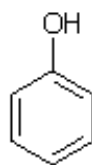
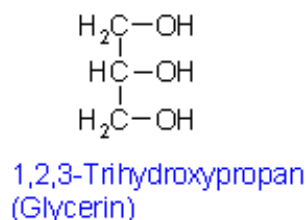
Isopropanol oder **2-Propanol** tertiär-Butanol oder **2-Methyl-2-propanol**

Bei den Alkoholen ist es üblich anzugeben ob es sich um primäre, sekundäre tertiäre Alkohole handelt.

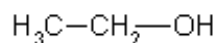


Neben den systematischen Benennung gibt es bei den Alkoholen einige Verbindungen, welche besser unter einem Trivialnamen bekannt sind. Beispiele hierfür sind:

Trivialnamen



Phenol

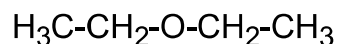


Ethanol (Alkohol)

2.3 Ether

Ether sind Kohlenwasserstoffverbindungen bei denen sich innerhalb der Kohlenstoffkette ein Sauerstoffatom befindet. Ihre Benennung erfolgt durch das alphabetische Voranstellen der Alkylgruppen vor die Endung –ether.

Beispiel:

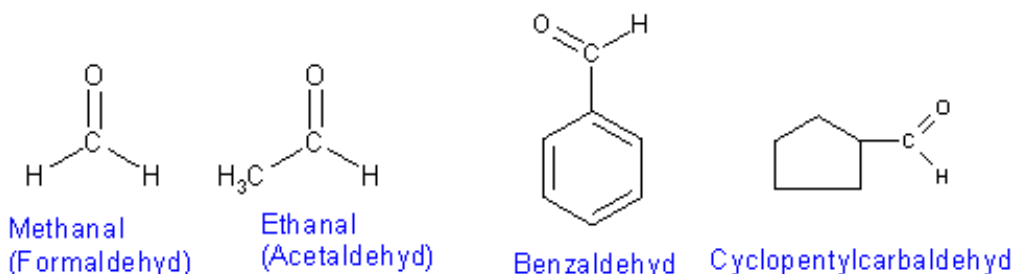


Diethylether

2.4 Aldehyde

Aldehyde sind Verbindungen bei denen ein endständiges Kohlenstoffatom eine Doppelbindung zu einem Sauerstoffatom aufweist. Ihre Benennung erfolgt durch das Anhängen der Endung -al an den Stammnamen des betreffenden Kohlenwasserstoffs.

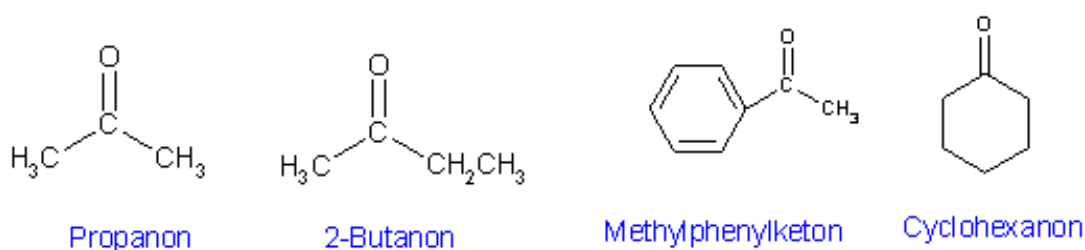
Beispiele:



2.5 Ketone

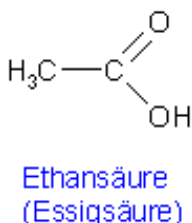
Der Name eines Ketons ergibt sich durch Anhängen der Endung –on an den Stammnamen des betreffenden Alkans.

Beispiele:



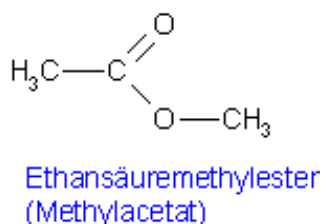
2.6 Carbonsäuren

Die Benennung der Carbonsäure erfolgt durch Anhängen der Endung –säure an den Stammnamen des Alkans.



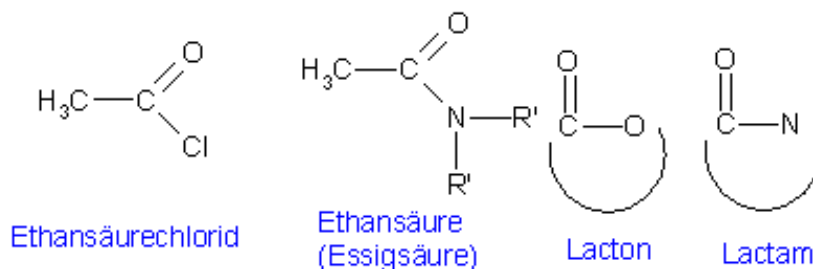
2.7 Ester

Ester sind Verbindungen die aus der Reaktion von Carbonsäuren mit Alkoholen entstehen. Ihr Name leitet sich von den entsprechenden Namen der Carbonsäuren und des Alkohols und Anhängen der Endung –ester ab.



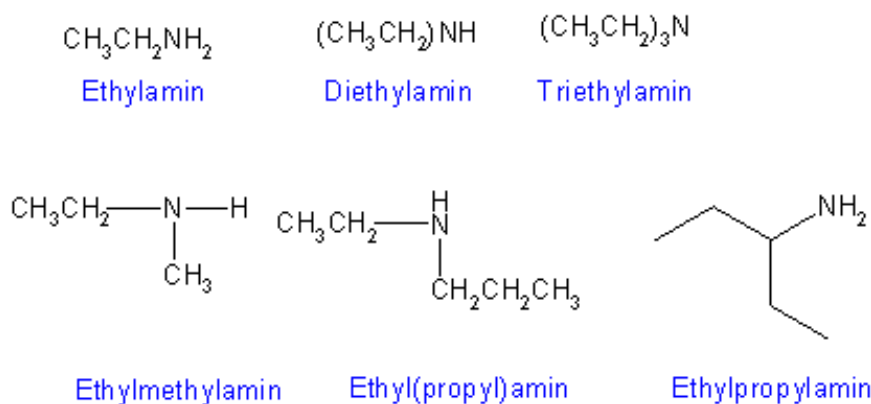
Cyclische Ester werden als Lactone bezeichnet. Wird bei einer Carbonsäure die OH-Gruppierung durch Chlorid ersetzt spricht man von einem Carbonsäurechlorid. Beim Ersetzen der OH-Gruppe durch eine Amidgruppierung spricht man entsprechend von

Carbonsäureamiden. Verbindungen in denen die OH-Gruppe durch eine Aminogruppe ausgetauscht ist und die cyclisch sind werden als Lactame bezeichnet.

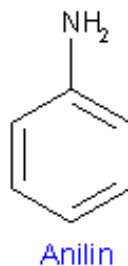


2.8 Amine

Amine sind Verbindungen, welche Stickstoff enthalten. Ihre Benennung erfolgt durch das Anhängen der Endung -amin an den entsprechenden Alkylrest.



Eine Aminverbindung von großer technischer Bedeutung ist das Benzolderivat Anilin.

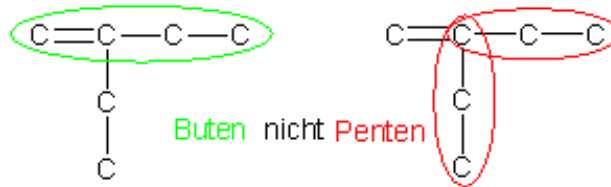


3.0 Alkene oder Olefine

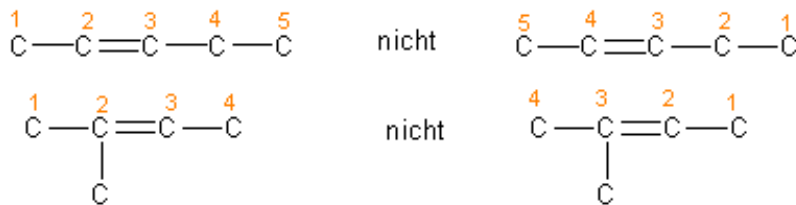
Alkene sind ungesättigte Kohlenwasserstoffe, dass heißt sie besitzen Kohlenstoff-Kohlenstoff-Doppelbindungen.

Nomenklatur der Alkene

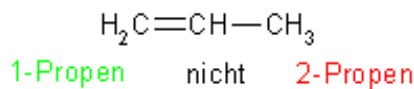
- Endung -en (-dien, -trien...)
- C-C-Dreifachbindung → Alkine → Endung -in
- beides: -enin
- Wählen Sie die längste Kette, die die Doppelbindung ($\text{C}=\text{C}$) enthält



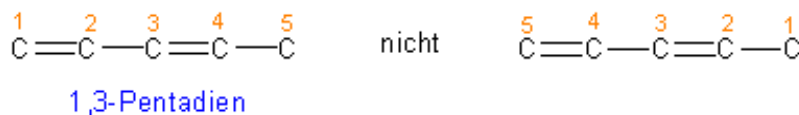
- Nummerieren Sie von dem Ende, das der Doppelbindung am nächsten ist



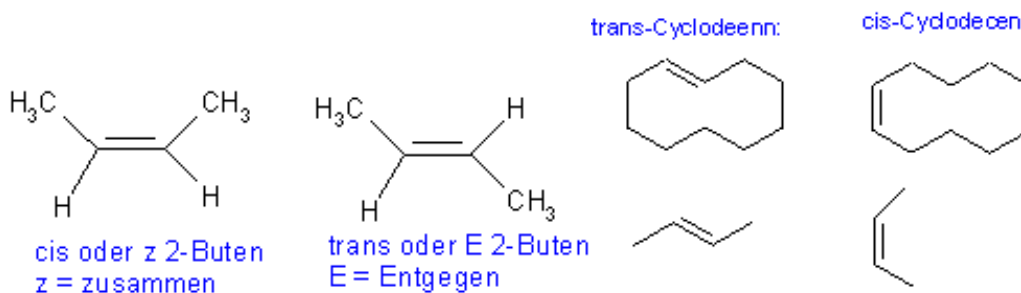
- Geben Sie nur das „niedrigste“ C-Atom der Doppelbindung an



- Mehrere Doppelbindungen



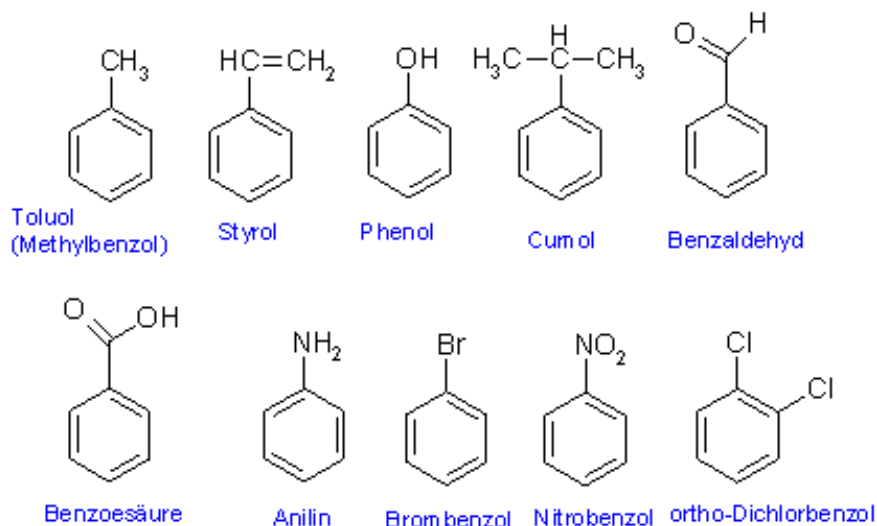
Neben diesen regeln zur Benennung von Alkenen ist noch die **cis-trans-Isomerie** der Alkene zu beachten.



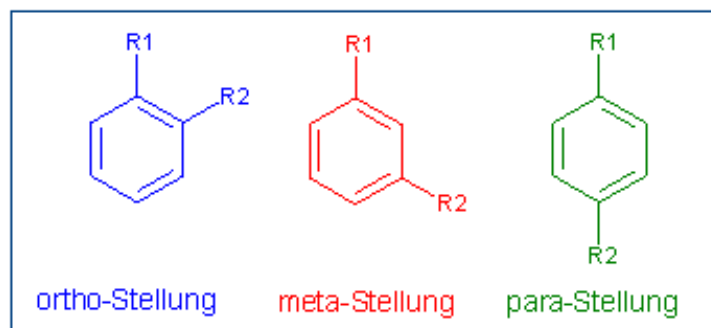
3.1 Aromatische Verbindungen

Aromatische Verbindungen sind planere, cyclische Kohlenwasserstoffverbindungen, welche konjugierte Kohlenstoff-Kohlenstoffbindungen aufweisen. Ihr bekanntester Vertreter ist das Benzol. Vom Benzol leiten sich nahezu alle bedeutenden Aromaten ab. Daher wird hier auch nur die Benennung von Benzolderivaten erläutert.

Die Benennung von Aromaten erfolgt durch das Benennen des Substituenten und anschließendes anhängen der Endung -benzol. Da Benzolderivat meist von großer technischer Bedeutung sind haben viele vom Benzol abgeleitete Verbindungen Trivialnamen.



Bei zweifach substituierten Benzolverbindungen gibt es verschiedene Möglichkeiten die Substituenten zu positionieren. Aus diesem Grunde wurden den verschiedene Bezeichnungen für die Positionen eingeführt.



4.0 Alkine

Die Benennung der Alkine erfolgt analog zur Benennung der Alkene, wobei statt der Endung –en –in eingesetzt wird.

Beispiele:

