IUPAC Nomenklatur

Der Name eines Moleküls wird in 3 Felder aufgeteilt:

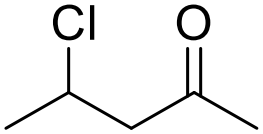
Feld 1: Name und Position von Substituenten (**Präfixe**)

Feld 2: Stammkern der Verbindung

Feld 3: funktionelle Gruppe mit höchster Priorität (**Suffix**)

Substituenten/ Präfix	Stammkern	(+Sättigung)	Funkt. Gruppe Suffix

Beispeil:



4-Chloro	pent	an	2-on

IUPAC Nomenklatur - Stammkern

Feld 2 (Stammkern)

C_1	Meth-	C_{11}	Undeca-	C_{21}	Henicosa-	C_{80}	Octaconta-
C_2	Eth-	C_{12}	Dodeca-	C_{22}	Docosa-	C_{90}	Nonaconta-
C_3	Propa-	C_{13}	Trideca-	C_{23}	Tricosa-	C_{100}	Hecta-
C_4	Buta-	C_{14}	Tetradeca-	C_{24}	Tetracosa-	C_{200}	Dicta-
C_5	Penta-	C_{15}	Pentadeca-	C_{25}	Pentacosa-	C_{300}	Tricta-
C_6	Hexa-	C_{16}	Hexadeca-	C_{30}	Triaconta-	C_{400}	Tetracta-
C_7	Hepta-	C_{17}	Heptadeca-	C_{40}	Tetraconta-	C_{500}	Pentacta-
C_8	Octa-	C_{18}	Octadeca-	C_{50}	Pentaconta-	C_{1000}	Kilia-
C_9	Nona-	C_{19}	Nonadeca-	C_{60}	Hexaconta-	C_{2000}	Dilia-
C_{10}	Deca-	C_{20}	Icosa-	C_{70}	Heptaconta-	C_{3000}	Trilia-

An diesen Stammkern wird ein Suffix angefügt, der den Sättigungszustand bezeichnet:

-an	gesättigter Kohlenwasserstoff
-en	Vorliegen von Doppelbindung(en)
-in	Vorliegen von Dreifachbindung(en)

EBERHARD KARLS
UNIVERSITÄT
TÜBINGEN

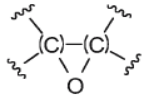
IUPAC Nomenklatur

Feld 3 (funkt. Gr.) **Suffix**

Funktionelle Gruppe	Formel	Präfix	Suffix
Carbonsäuren	-COOH -[C]OOH	Carboxy-	-carbonsäure -säure
Percarbonsäure	-CO-OOH -[C]O-OOH	Peroxycarbonyl-	-peroxycarbonsäure Peroxy...säure
Sulfonsäuren	-SO_3H	Sulfo-	-sulfonsäure
Carbonsäureanhydride	R-CO-O-CO-R'		-säureanhydrid
Carbonsäureester	-COOR -[C]OOH	Alk(yl)oxycarbonyl-	-carbonsäurealkylester -säurealkylester
Carbonsäurehalogenide	-COX -[C]OX	Halogencarbonyl-	-carbonsäurehalogenid -säurehalogenid
Carbonsäureamide	-$CONH_2$	Aminocarbonyl- (trad. Carbamoyl-)	-carbonsäureamid
Carbonsäurehydrazide	-CONH-NH_2	Hydrazinocarbonyl-	-carbonsäurehydrazid
Nitrile	-C≡N -[C]≡N	Cyano-	-carbonitril -nitril
Aldehyde	-CHO -CHO	Formyl- Oxo-	-carbaldehyd -al
Ketone	-CO-	Oxo-	-on
Oxime	=N-OH	Hydroxyimino-	-aloxim -onoxim
Hydrazone	=N-NH_2	Hydrazono-	-alhydrazon -onhydrazon
Alkohole	-OH	Hydroxy-	-ol
Thiole	-SH	Sulfanyl- (trad. Mercapto-)	-thiol
Amine	-NH_2	Amino-	-amin

Feld 1 (Substituenten) **Präfix**

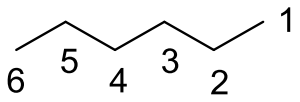
Tabelle 6. Charakteristische Gruppen, die nur als Präfixe auftreten

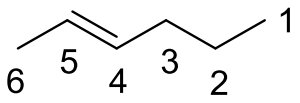
Charakteristische Gruppe	Präfix (Gattungsname)
–N_3	Azido … (Azid)
–Br	Brom … engl. Bromo … usw.
–Cl	Chlor …
–ClO	Chlorosyl …
–ClO_2	Chloryl …
–OCN	Cyanato … Cyanat
=N_2	Diazo …
	Epoxy … (tradit.)
–F	Fluor …
–OOH	Hydroperoxy …
–NHOH	Hydroxyamino … (Hydroxylamin)
–$NHNH_2$	Hydrazino … system. Diazanyl …
–NCO	Isocyanato …
–NC	Isocyan … (Isocyanid, Isonitril)
–NCS	Isothiocyanato …
–I	Iod …
–IO	Iodosyl … (früher Iodoso …)
–IO_2	Iodyl … (früher Iodo …)
–NO_2	Nitro …
=N(O)OH	aci-Nitro … system. Hydroxynitroryl …
–NO	Nitroso …
–ClO_3	Perchloryl …
–SCN	Thiocyanato …
–OOR	… yldioxy … (Peroxid)
–OR, –SR usw.	… yloxy …, … ylthio … (Ether, Thioether etc.) system.: … ylsulfanyl etc.

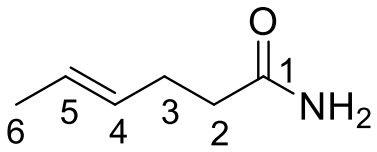
IUPAC Nomenklatur

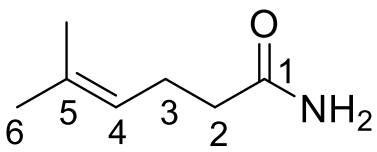
Vorgehensweise bei der Umwandlung von Name zu Struktur

- Stammname identifizieren (Feld 2) und längste Kohlenstoffkette zeichnen
- Grad der Sättigung identifizieren (an, en oder in) und an die richtige Position zeichnen
- Funktionelle Gruppe identifizieren und einzeichnen (Feld 3)
- Substituenten anbringen (Feld 1)









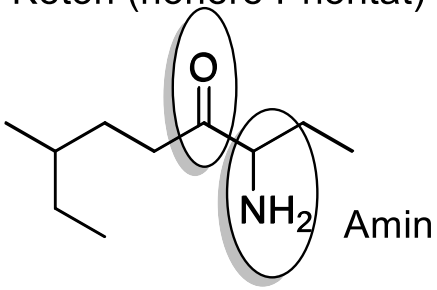
Beispiel: 5-Methylhex-4-enamid

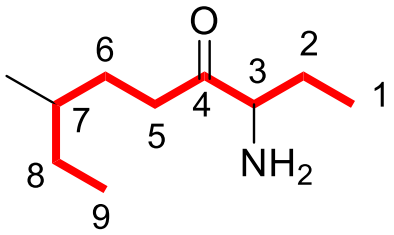
IUPAC Nomenklatur

Vorgehensweise bei der Benennung nach IUPAC (vereinfacht)

- Funktionelle Gruppe identifizieren und nach Priorität ordnen (Feld 3)

Keton (höhere Priorität)





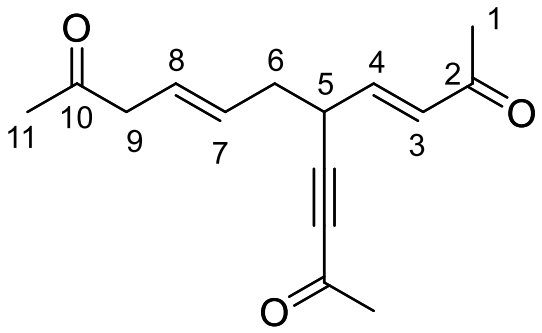
- Längste Kohlenstoff-Kette mit funktioneller Gruppe (Feld 2) (s. auch S.6)
- Nummerierung → funktionelle Gruppe bekommt möglichst niedrige Zahl
- Substituenten werden mit ihren Präfixen angehängt (Feld 1)

3-Amino-7-methyl	nonan	4-on

Stammkern finden – genaue Reihenfolge

1. **größte Anzahl** der - durch ein Suffix zu benennenden – **Hauptfunktion**
2. **größte Anzahl** von **C-C-Mehrfachbindungen insgesamt**, also C-C-Doppelbindungen und C-C-Dreifachbindungen zusammen
3. **längste Kette** von C-Atomen
4. **größte Anzahl** von **C-C-Doppelbindungen**
5. **niedrigster Lokantensatz** für die **Hauptfunktion**
6. **niedrigster Lokantensatz** für die **C-C-Mehrfachbindungen**
7. **niedrigster Lokantensatz** für die **C-C-Doppelbindungen**
8. **größte Zahl** von **Substituenten**
9. **niedrigster Lokantensatz** für die **Substituenten**
10. **Ranghöchster Substituent** nach der alphabetischen Ordnung
11. **niedrigster Lokantensatz** für die **alphabetisch ranghöchsten Substituenten**

Stammkern finden – genaue Reihenfolge



1. die größte Anzahl der Hauptfunktion
⇨ 3 Möglichkeiten (3 mal Keton)

2. die größte Anzahl von C-C-Mehrfach-bindungen insgesamt ⇨ 3 Möglichkeiten

3. die längste unverzweigte Kette von C-Atomen ⇨ 2 Möglichkeiten (je 11 C)

4. die größte Anzahl von C-C-Doppelbindungen ⇨ **1 Möglichkeit**
⇨ **Stammkern** gefunden, aber Nummerierung unklar

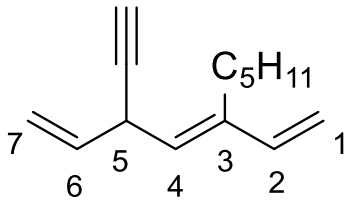
5. den niedrigsten Lokantensatz für die Hauptfunktionn
⇨ 2 Möglichkeiten (Keton jeweils an 2,10)

6. den niedrigsten Lokantensatz für die C-C-Mehrfachbindungen
⇨ **1 Möglichkeit** (DB an 3,7 vs. DB an 4,8)

⇨ **Stammkern: Undeca-3,7-dien**

⇨ **IUPAC-Name: 5-(3-Oxobut-1-inyl)undeca-3,7-dien-2,10-dion**

Stammkern finden – genaue Reihenfolge



1. die größte Anzahl der Hauptfunktion
⇨ entfällt

2. die größte Anzahl von C-C-Mehrfach-bindungen insgesamt ⇨ 2 Möglichkeiten

3. die längste unverzweigte Kette von C-Atomen ⇨ 2 Möglichkeiten (je 7 C)

4. die größte Anzahl von C-C-Doppelbindungen ⇨ **1 Möglichkeit**
⇨ **Stammkern** gefunden, aber Nummerierung unklar

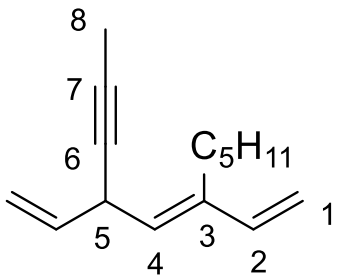
5. den niedrigsten Lokantensatz für die Hauptfunktionn
⇨ entfällt

6. den niedrigsten Lokantensatz für die C-C-Mehrfachbindungen
⇨ **1 Möglichkeit** (DB an -1,3,6- vs. DB an -1,4,6-)

⇨ **Stammkern: Hepta-1,3,6-trien**

⇨ **IUPAC-Name: (3*E*)-5-Ethinyl-3-pentylhepta-1,3,6-trien**

Stammkern finden – genaue Reihenfolge



1. die größte Anzahl der Hauptfunktion
⇨ entfällt

2. die größte Anzahl von C-C-Mehrfach-bindungen insgesamt ⇨ 2 Möglichkeiten

3. die längste unverzweigte Kette von C-Atomen ⇨ **1 Möglichkeit**
⇨ **Stammkern** gefunden, aber Nummerierung unklar

4. und 5.
⇨ entfällt, da Stemmkern schon gefunden

6. den niedrigsten Lokantensatz für die C-C-Mehrfachbindungen
⇨ **1 Möglichkeit** (Mehrfachbindung an -1,3,6-)

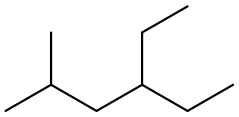
⇨ **Stammkern: Octa-1,3-dien-6-in**

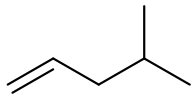
⇨ **IUPAC-Name: (3*E*)-3-Pentyl-5-vinylocta-1,3-dien-6-in**

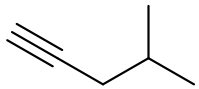
Generelle Bezeichung: Alken, Alkin, Alkenin (+ di, tri…)

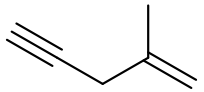
IUPAC Nomenklatur

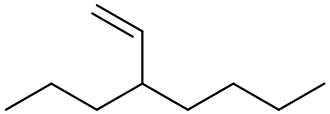
Benennen Sie die folgenden Verbindungen systematisch nach IUPAC

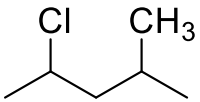


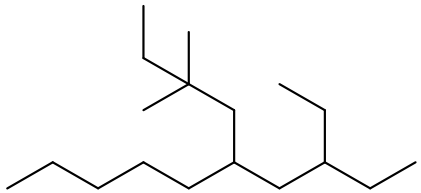


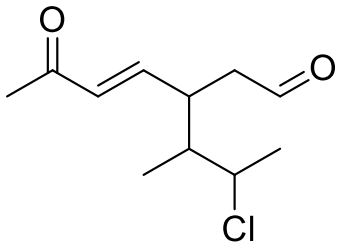


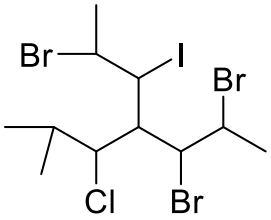






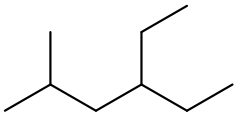




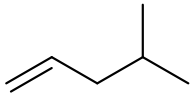


IUPAC Nomenklatur

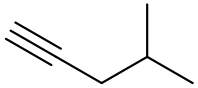
Benennen Sie die folgenden Verbindungen systematisch nach IUPAC



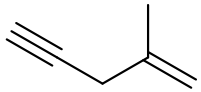
4-Ethyl-2-methylhexan



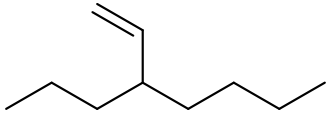
4-Methylpent-1-en



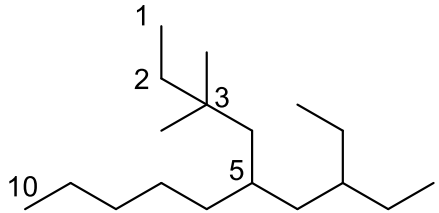
4-Methylpent-1-in



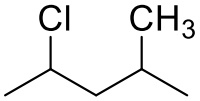
2-Methylpent-1-en-4-in



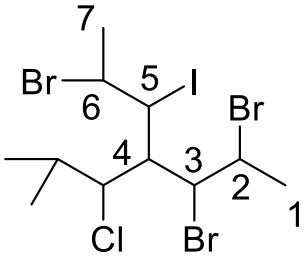
3-Propyl-hept-1-en



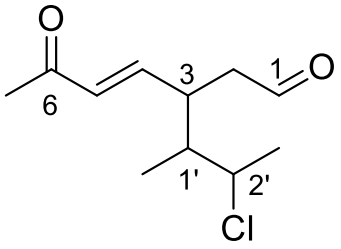
5-(2-Ethylbutyl)-3,3-dimethyldecan



2-Chlor-4-methylpentan

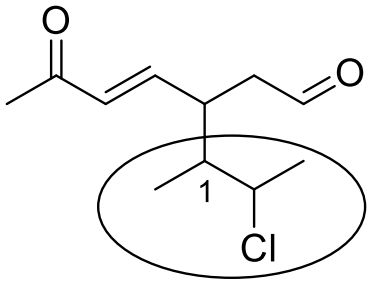


2,3,6-Tribrom-4-(1-chlor-2-methylpropyl)-5-iodoheptan



(*E*)-3-(2-Chlor-1-methylpropyl)-6-oxohept-4-enal

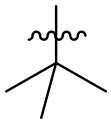
IUPAC Nomenklatur - Verzweigte Reste



Das C-Atom am Stamm bekommt die Nummer 1
⇨ (2-Chlor-1-methylpropyl)

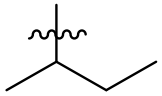
Vollständiger Name:
(*E*)-3-(2-Chlor-1-methylpropyl)-6-oxohept-4-enal

Aber:
Bestimmte Reste haben einen Trivialnamen (nur unsubstituiert)

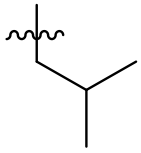


tert-**B**utyl ← **IUPAC** → *sec*-**B**utyl

(1,1-Dimethylethyl)



(1-Methylpropyl)



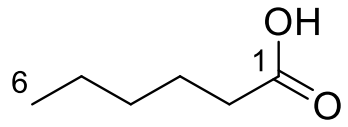
Isobutyl

(2-Methylpropyl)

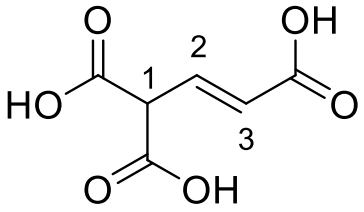
weitere Alkyl-Reste:
Isopropyl-
Isopentyl-
tert-Pentyl-
Neopentyl-

IUPAC Nomenklatur

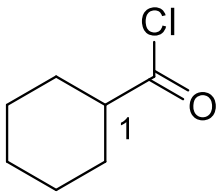
Alternative Benennung: Mehrfache oder cyclische Carbonsäuren, Carbonsäurederivaten, Nitrile, Aldehyde



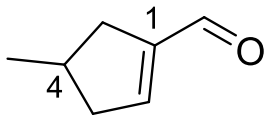
Normale Benennung: Hexansäure



Mehrfache Carbonsäure, alternative Benennung:
Prop-2-en-1,1,3-**tricarbonsäure**



Cyclische Carbonsäurederivat, alternative Benennung (nur wenn die Funktion direkt am Ring gebunden ist):
Cyclohexan**carbonylchlorid**



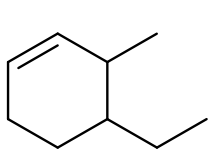
4-methylcyclopent-1-ene-1-carbaldehyde

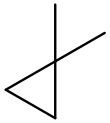
Cyclischer Aldehyd, alternative Benennung:
4-Methylcyclopent-1-en**carbaldehyd**

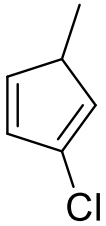
IUPAC Nomenklatur

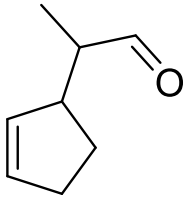
- Mit cyclischen Verbindungen wird ähnlich verfahren wie mit acyclischen Verbindungen **+ Präfix Cyclo**
- Ringe haben nicht automatisch Vorrang vor Ketten!

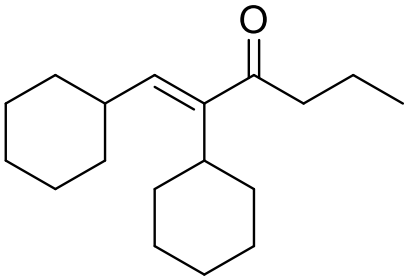
  Bei reinen Kohlenwasserstoffen gilt:
  1. Anzahl der Substituenten; dann
  2. Anzahl C-Atome

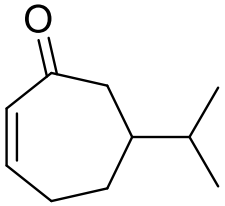


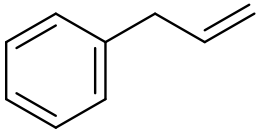


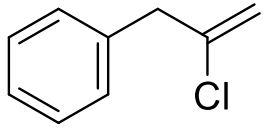




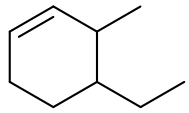






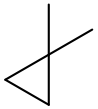


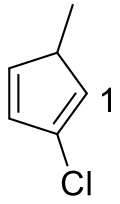
IUPAC Nomenklatur



4-Ethyl-3-methylcyclohexen

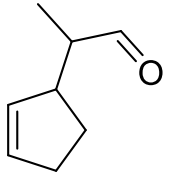
1,1-Dimethylcyclopropan

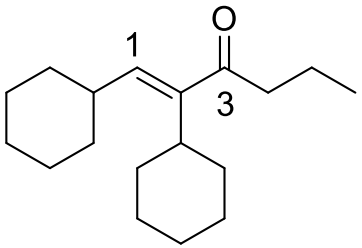




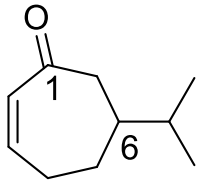
2-Chlor-5-methylcycloprop-1,3-dien

2-Cyclopent-2-enylpropanal



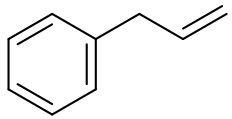


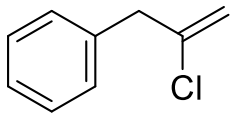
(*E*)-1,2-Dicyclohexylhex-1-en-3-on



6-Isopropylcyclohept-2-enon

Allylbenzol





2-Chlor-3-phenylpropen