

Systematische Namen

Die IUPAC-Regeln werden auf folgende Probleme angewendet:

- Ermittlung eines Namens aus einer gegebenen Struktur
- Umsetzung eines Namens in eine chemische Strukturformel

Der Name eines Moleküls wird in 4 Felder aufgeteilt:

- Feld 1: Name und Position von Substituenten
- Feld 2: Stammname der Verbindung
- Feld 3: Grad der Ungesättigkeit
- Feld 4: Prinzipielle (wichtigste) funktionelle Gruppe

Tabelle: Zusammensetzung des IUPAC-Namens einer organischen Verbindung

Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4
Substituenten	Stammname	Grad der Ungesättigkeit	Funktionelle Gruppe
Beispiele			
4-Chloro-2-pentanon 4-Chloro-	pent	an	2-on
2,3-Dimethyl-2-hexen 2,3-Dimethyl-	hex	2-en	
3,3-Diphenylcyclobutanol 3,3-Diphenyl	cyclobut	an	ol
3-Hydroxybutanal 3-Hydroxy	but	an	al

Da ein Molekül mehrere funktionelle Gruppen enthalten kann, muss eine Prioritätenreihenfolge festgelegt werden (Carboxylgruppe besitzt die höchste Priorität, ein Alkin die niedrigste): Diese Gruppe gibt Feld 4 vor; die anderen funktionellen Gruppen werden als Substituenten behandelt. Dabei werden die Präfixe der übernächsten Tabelle benutzt.

Tabelle: Priorität funktioneller Gruppen

Funktionelle Gruppe	Name
—COOH	Carbonsäure
$\text{—SO}_3\text{H}$	Sulfonsäure
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{OR} \end{array}$	Ester
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$	Säurechlorid
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$	Amid
$\text{—C}\equiv\text{N}$	Nitril
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{H} \end{array}$	Aldehyd
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{R} \end{array}$	Keton
—OH	Alkohol / Phenol
—SH	Thiol
—NH_2	Amin
$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C} \\ \diagdown \end{array}$	Alken
$\text{—C}\equiv\text{C—}$	Alkin

Tabelle: Übersicht von Präfixen für häufige Substituenten

Substituent	Präfix (Vorsilbe)	Substituent	Präfix
—R	Alkyl-	—F	Fluoro-
—OR	Alkoxy-	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{H} \end{array}$	Formyl-
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{—C—} \\ \\ \text{R} \end{array}$	Acyl-	—OH	Hydroxy-
—NH_2	Amino-	—I	Iodo-
—Br	Bromo-	—NO_2	Nitro-
—COOH	Carboxy-	—SH	Mercapto-
—Cl	Chloro-	=O	Oxo-
$\text{—C}\equiv\text{N}$	Cyano-		

Tabelle: Suffixe (Nachsilbe) zur Angabe der Ungesättigtheit

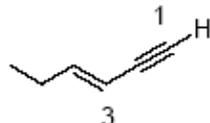
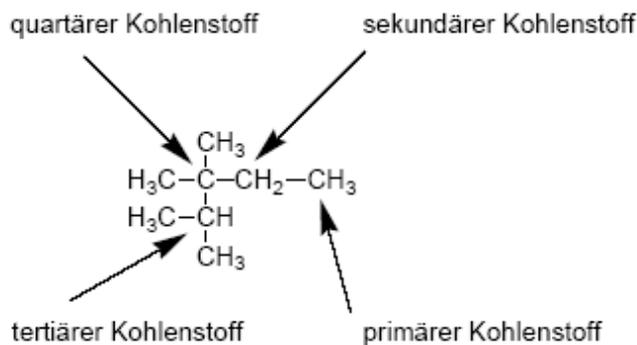
Suffix	Bedeutung	Beispiel (Name)	Formel
-an	Keine C-C Doppel- oder Dreifachbindung	Butan	$\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3$
-en	Eine C-C Doppelbindung	1-Buten	$\text{CH}_2\text{=CH—CH}_2\text{—CH}_3$
-in	Eine C-C Dreifachbindung	2-Butin	$\text{CH}_3\text{—C}\equiv\text{C—CH}_3$
-dien	Zwei Doppelbindungen	1,3-Pentadien	$\text{CH}_2\text{=CH—CH=CH—CH}_3$
-enin	Eine Doppelbindung, eine Dreifachbindung	Hex-3-en-1-in	

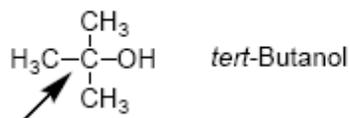
Tabelle: Strukturen und Stammnamen von Alkanen (C_nH_{2n+2})

n	Formel	Name	Stammname	Zahl der Isomere
1	CH ₄	Methan	Meth-	1
2	C ₂ H ₆	Ethan	Eth-	1
3	C ₃ H ₈	Propan	Prop-	1
4	C ₄ H ₁₀	Butan	But-	2
5	C ₅ H ₁₂	Pentan	Pent-	3
6	C ₆ H ₁₄	Hexan	Hex-	5
7	C ₇ H ₁₆	Heptan	Hept-	9
8	C ₈ H ₁₈	Octan	Oct-	18
9	C ₉ H ₂₀	Nonan	Non-	35
10	C ₁₀ H ₂₂	Decan	Dec-	75
11	C ₁₁ H ₂₄	Undecan	Undec-	
12	C ₁₂ H ₂₆	Dodecan	Dodec-	
20	C ₂₀ H ₄₂	Eicosan	Eicos-	

Zahl der gebundenen C-Atome	Bezeichnung	Zahl anderer Reste (H, OH, etc.)
1	primärer Kohlenstoff	3
2	sekundärer Kohlenstoff	2
3	tertiärer Kohlenstoff	1
4	quartärer Kohlenstoff	0

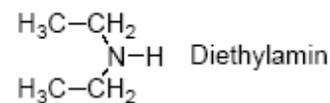


Bsp.:



tertiärer Kohlenstoff (mit 3 anderen C verknüpft)

bei Aminen: Zahl der an N-Atome gebundene C-Atome



sekundäres Amin

Vom einfachsten Alkan, dem Methan lassen sich folgende Gruppen ableiten:

—CH₃ Methylgruppe

—CH₂— Methylengruppe

$\begin{array}{c} | \\ \text{—CH—} \end{array}$
 oder $\begin{array}{c} | \\ =\text{CH} \end{array}$
 Methingruppe

≡C—H Methylidingruppe

Vorgehensweise bei Umwandlung der Struktur in einen Namen:

- Prinzipielle funktionelle Gruppe identifizieren (Feld 4)
- längste Kohlenstoffkette, die ebenso die prinzipielle funktionelle Gruppe enthält identifizieren; diese Kette wird zum Stammwort des Namens (Feld 2). Ist die Verbindung cyclisch, wird der Ring, der an die funktionelle Gruppe gebunden ist, zum Stammwort.
- Nun erfolgt die Nummerierung der Kette, wobei darauf zu achten ist, dass die prinzipielle funktionelle Gruppe, die niedrigste mögliche Ziffer erhält.
- Danach werden Mehrfachbindungen identifiziert und die entsprechenden Suffixe zwischen dem Stammwort und dem Suffix für die prinzipielle Gruppe eingeschoben.
- Die Substituenten werden durch Anhängen der entsprechenden Vorsilben an den Namen spezifiziert. Dabei werden die Präfixe in alphabetischer Reihenfolge arrangiert, wobei Vorsilben zu Zahlenangabe ignoriert werden. (3-Ethyl-2,2-dimethyl anstatt 2,2-dimethyl-3-ethyl; ethyl vor methyl etc.)
- Schließlich werden stereochemische Descriptoren (E, Z, R, S etc.) inkludiert.

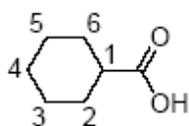
Vorgehensweise bei Umwandlung des Namens in eine Struktur:

- Stammname identifizieren (Feld 2), zumeist griechische Zahlsilben: bei acyclischen Verbindungen: längste ununterbrochene C-Kette bei Ringen: Vorsilbe Cyclo
- Zickzackkette zeichnen und Verbindung nummerieren
- **Ausnahme:** Aromatische Verbindungen (sogenannte Arene). Organische Moleküle, die auf Benzol basieren (engl. Benzene). Stammwort ist **Benz**. Merkmal von Benzolderivaten: 6-gliedriger Carbocyclus, mit alternierenden Einfach- und Doppelbindungen. Für Arene sind Trivialnamen geläufig.
- Ungesättigtheitsindex identifizieren und Mehrfachbindungen einzeichnen.
- Prinzipielle funktionelle Gruppe identifizieren und einzeichnen.
- Substituenten anbringen.

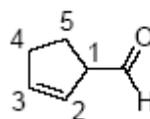
Sonderfall: Falls eine endständige Gruppe an einen Ring geknüpft ist, wird ein anderer Suffix benutzt. Dies hängt damit zusammen, dass die Ringgröße das C-Atom, welches Teil der funktionellen Gruppe ist, nicht berücksichtigt.

Bsp.:

Funktionelle Gruppe	Suffix
Aldehyd	carboxaldehyd
Carbonsäure	carbonsäure

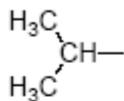


Cyclohexancarbonsäure
cyclohex = Ring mit 6 C-Atomen
an = gesättigt
carbonsäure = Carboxylgruppe an C1 geknüpft

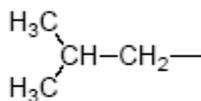


2-Cyclopentencarboxaldehyd
cyclopent = Ring mit 5 C-Atomen
en = Doppelbindung an C2
carboxaldehyd = Aldehydfunktion an C1 geknüpft

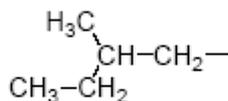
Reste



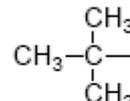
Isopropyl- (2-Propyl-)



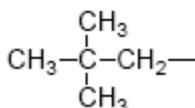
Isobutyl- (2-Methyl-1-propyl-)



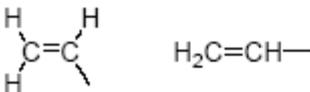
sek-Butyl- (2-Butyl-)



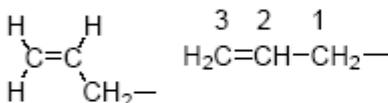
tert-Butyl- (2-Methyl-2-propyl-)



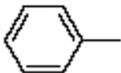
Neopentyl- (2,2-Dimethyl-1-propyl-)



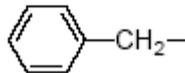
Vinyl- oder Ethenyl-



Allyl- oder 1-(2-Propenyl)-

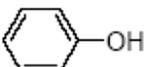
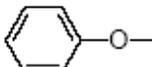


Phenyl-



Benzyl- (besitzt extra CH₂-Gruppe)

Alkoxygruppen als Substituenten

Alkohol bzw. Phenol		Alkoxygruppe	
$\text{CH}_3\text{---OH}$	Methanol	$\text{CH}_3\text{---O---}$	Methoxy-
$\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---OH}$	Ethanol	$\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---O---}$	Ethoxy-
$\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---OH}$	Propanol	$\text{CH}_3\text{---CH}_2\text{---CH}_2\text{---O---}$	Propoxy-
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH---OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	Isopropanol	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH---O---} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	Isopropoxy-
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{---C---OH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	tert-Butanol	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{---C---O---} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	tert-Butoxy-
	Phenol		Phenoxy-