

Erweiterung und Revision der Nomenklatur der Spiroverbindungen**

Die Übersetzung basiert auf der „Extension and Revision of the Nomenclature for Spiro Compounds“ der Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (III.1) der Organic Chemistry Division der International Union of Pure and Applied Chemistry, veröffentlicht in *Pure Appl. Chem.* **1999**,

71, 531–558. Sie ist auch im Internet unter der Adresse <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/spiro/> zugänglich. Das Original wurde von G. P. Moss (Queen Mary University, London) für die Veröffentlichung vorbereitet.

Obmann und Übersetzer: Dr. Karl-Heinz Hellwich*

Der Working Party (1992–1998) gehörten folgende Personen an: P. M. Giles, Jr. (USA), E. W. Godly (Großbritannien), K.-H. Hellwich (Deutschland), A. K. Ikizler (Türkei), M. V. Kisakürek (Schweiz), A. D. McNaught (Großbritannien), G. P. Moss (Großbritannien), J. Nyitrai (Ungarn), W. H. Powell (USA), O. Weißbach (Deutschland), A. Yerin (Rußland).

Die Commission on Nomenclature of Organic Chemistry umfasste während der Vorbereitung dieses Berichts folgende Personen: Titularmitglieder: J. Blackwood (1996–1997), H. J. T. Bos (1987–1995, stellvertretender Vorsitzender 1991–1995), B. J. Bos-senbroek (ab 1998), J. R. Bull (1987–1993), F. Cozzi (ab 1996), H. A. Favre (ab 1989, Vorsitzender ab 1991), P. M. Giles, Jr. (1989–1995), E. W. Godly (1987–1993, Schriftführer 1989–1993), B. J. Herold (1994–1997), M. V. Kisakürek (1994–1997, stellvertretender Vorsitzender 1996–1997), D. Tavernier (1991–1995), J. G. Traynham (ab 1991, Schriftführer ab 1994), J. L. Wiśniewski (ab 1991); assoziierte Mitglieder: F. Cozzi (1994–1995), F. Fariña† (1989–1994), A. A. Formanovsky (ab 1998), P. Grünanger (1987–1993), K.-H. Hellwich (ab 1998), B. J. Herold (ab 1998), R. J.-R. Hwu (1989–1997), M. A. C. Kaplan (1989–1997), M. V. Kisakürek (1987–1993, ab 1998), A. J. Lawson (ab 1991), W. Liebscher (1989–1997), M. Mikołajczyk (1989–1997), J. Nyitrai (ab 1994), C. Schmitz (1989–1993), H. A. Smith, Jr. (ab 1994), J. H. Stocker (ab 1991), D. Tavernier (1987–1991, 1996–1997), S. S.-C. Tsay (ab 1998), A. Yerin (ab 1998); Ländervertreter: R. Bicca de Alencastro (Brasilien, 1994–1997), S. Chandrasekaran (Indien, 1994–1995), Q.-Y. Chen (China, ab 1991), G. Déák† (Ungarn, 1979–1992), A. A. Formanovsky (Rußland, 1996–1997), M. J. Gašić (Jugoslawien, 1989–1993), E. W. Godly (Großbritannien, 1994–1997), B. J. Herold (Portugal, 1991–1993), S. Ikegami (Japan, ab 1986), A. K. Ikizler (Türkei, 1987–1997), J. Kahovec (Tschechische Republik, ab 1989), P. Kristian (Slowakei, 1994–1997), Eun Lee (Republik Korea, ab 1994), X. T. Liang (China, 1987–1993), L. Maat (Niederlande, 1989–1991, ab 1996), G. P. Moss (Großbritannien, ab 1998), J. Nyitrai (Ungarn, 1992–1993), L. J. Porter (Neuseeland, 1987–1995), J. A. R. Rodrigues (Brasilien, ab 1998), A. Varvoglis (Griechenland, 1991–1993), M. S. Wadia (Indien, ab 1996).

[*] Dr. K.-H. Hellwich

Beilstein Chemiedaten und Software GmbH
Trakehner Straße 7–9, 60487 Frankfurt (Deutschland)
Fax: (+49) 69-716731-19
E-mail: khellwich@beilstein-cds.de

[**] Copyright© der englischen Fassung: International Union of Pure and Applied Chemistry, 1999. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation sowie Dr. G. P. Moss für die elektronische Fassung des englischen Manuskripts. – Anmerkung zu dieser Übersetzung: Hier werden einige Gepflogenheiten des Chemical Abstracts Service (CAS) und des Beilstein-Instituts erwähnt. Dies geschieht nur informationshalber, es handelt sich also in solchen Fällen nicht notwendig um Empfehlungen der Kommission. Des Weiteren wurden Unstimmigkeiten des Originals bereinigt, ohne dass darauf immer explizit hingewiesen wird.

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Allgemeinsprache essentiell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die letzte Übersetzung erschien in Heft 17/2002, die nächste (Definitionen zu Fachaussdrücken zur Diffusion im festen Zustand) ist für Heft 23/2002 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

In Spiroringsystemen sind zwei oder mehr Ringe durch ein gemeinsames Atom verknüpft. Zur Benennung solcher Systeme sind mehrere Verfahren in Gebrauch. Die Regeln A-41, A-43, B-10 und B-12 (*Nomenclature of Organic Chemistry*^[5]) beschreiben die Grundlagen der Benennung solcher Verbindungen. Die alternativen Verfahren in den Regeln A-42 und B-11 werden abgeschafft. Das vorliegende Dokument beschreibt die Nomenklatur ausführlicher und erweitert sie für verzweigte Polyspiro-systeme und Verbindungen, in denen drei Ringe ein gemeinsames Spiroatom haben. Eine neue Notation, die auf der von-Baeyer-Methode zur Benennung von Spirosystemen mit ausschließlich monocyclischen Komponenten beruht, erlaubt, sowohl unverzweigte als auch verzweigte Polyspiro-systeme ohne Mehrdeutigkeit zu benennen. Sie ermöglicht auch eine leichte Interpretation der Namen.

Vorwort

Der Name Spiran wurde von von Baeyer^[1] für bicyclische Verbindungen mit nur einem beiden Ringen gemeinsamen Atom vorgeschlagen. Radulescu^[2] erkannte, dass, wenn ein polycyclisches Ringsystem mit einem anderen Ring oder Ringsystem spiroverknüpft ist, jedes Ringsystem getrennt benannt werden muss und außerdem Einzelheiten der Spiroverknüpfung angegeben werden müssen. Diese beiden Systeme wurden von Patterson^[3] in seine Studie über Ringsysteme übernommen. Eine dritte Methode zur Benennung von Spiroverbindungen^[4] wurde von der Chemical Society angewendet. Diese wurde zusammen mit den beiden anderen in den IUPAC-Regeln dokumentiert.^[5] Das von-Baeyer-System wurde in den Regeln A-41.1 bis A-41.3, A-43.1, B-10.1 und B-12.1 behandelt (für weitere Beispiele siehe auch C-331.2, C-514.3, D-6.24, D-6.93 und D-7.51). Seine Erweiterung auf drei oder mehr spiroverknüpfte Monocyclen findet sich in Regel A-41.6. Die Methode für Systeme, die polycyclische Komponenten enthalten, ist in den Regeln A-41.4, A-41.7, A-43.1, B-10.2 und B-12.1 behandelt und die dritte Methode, die hier nicht verwendet wird, in den Regeln A-42 und B-11.1. Darüber hinaus existiert eine besondere Methode, wenn beide polycyclischen Systeme identisch sind; diese beschreiben die Regeln A-41.5, B-10.2, D-6.71 und D-6.94. Verwiesen sei auch auf die Zusammenfassung in der Empfehlung R-2.4.3.^[6] Weitere Beispiele sind in dem Dokument über Radikale, Ionen und Radikalionen aufgeführt.^[7]

Im Folgenden werden nur das von-Baeyer-System sowie die Spirobi[...]- und Spiro[...]-Methoden dokumentiert und auf kompliziertere Systeme, zum Beispiel verzweigte Spiro-systeme, ausgedehnt. In den meisten Fällen sind die Verfahren eng an die Praxis in den *Chemical Abstracts*^[8] angelehnt. Auf Unterschiede wird hingewiesen.

Diese Empfehlung ersetzt die Regeln A-41, A-43, B-10, B-12 und R-2.4.3. Die in den Regeln A-42 und B-11 beschriebenen alternativen Verfahren werden abgeschafft.

SP-0: Die Bezeichnung Spiro

Eine Spiroverbindung enthält zwei (oder drei) Ringe, die nur ein Atom gemeinsam haben. Diese zwei (oder drei) Ringe sind nicht über eine Brücke verbunden, können aber Bestandteil anderer Ringsysteme sein (anellierter Ringsysteme, verbrückter anellierter Ringsysteme, von Systemen, die nach der von-Baeyer-Nomenklatur benannt sind, usw.). Das gemeinsame Atom heißt Spiroatom. Das Ergebnis der Spiroverknüpfung wurde auch als Spiroeinheit bezeichnet.

SP-1: Verbindungen mit ausschließlich monocyclischen Komponenten

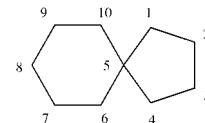
SP-1.1

Der Name eines Monospirokohlenwasserstoffs aus zwei Monocyclen ergibt sich aus dem Präfix Spiro vor einem von-Baeyer-Deskriptor in eckigen Klammern (der in aufsteigender Reihenfolge und durch einen Punkt voneinander getrennt die Zahl der Kohlenstoffatome angibt, die in jedem Ring an das Spiroatom gebunden sind) und dem Namen des Stammkohlenwasserstoffs, der die Gesamtzahl der Gerüstatome anzeigt, z.B. Spiro[4.4]nonan.

SP-1.2

Monospirokohlenwasserstoffe aus zwei Monocyclen werden an einem dem Spiroatom benachbarten Atom im kleineren Ring beginnend fortlaufend beziffert. Man beziffert um den kleineren Ring herum zurück zum Spiroatom und dann um den zweiten Ring.

Beispiel:



Spiro[4.5]decan

nicht Spiro[5.4]decan

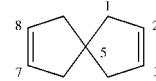
SP-1.3

Heteroatome werden durch Austauschpräfixe (Regeln B-4.2, B-6.1^[5] sowie R-1.2.2.1 und R-9.3^[6]), Unsaturation in der gewohnten Weise (Regel A-11.3,^[5] R-3.1.1^[6]) mit den Endungen -en, -dien usw. angegeben.

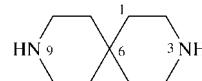
Beispiele:



8-Azaspiro[4.5]dec-2-en



Spiro[4.4]nona-2,7-dien

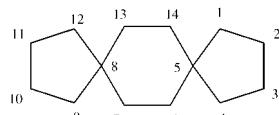


3,9-Diazaspiro[5.5]undecan

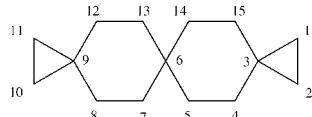
SP-1.4

Die Namen unverzweigter Polyspirokohlenwasserstoffe, die nur aus Monocyclen aufgebaut sind, ergeben sich aus den Präfixen Dispiro, Trispiro usw., die die Gesamtzahl der vorhandenen Spiroatome anzeigen, dem von-Baeyer-Deskriptor, der die Zahl an Kohlenstoffatomen angibt, die an ein Spiroatom gebunden sind oder Spiroatome verbinden, und dem Namen des Stammkohlenwasserstoffs, der der Gesamtzahl der Gerüstatome entspricht. Die Zahlen des Deskriptors werden der Reihe nach aufgeführt – beginnend an einem endständigen Ring hinüber zum anderen endständigen Ring und zurück zum ersten über die anderen verbindenden Einheiten; sie werden durch Punkte getrennt und in eckige Klammern eingeschlossen. Die Verbindung wird in der Reihenfolge beziffert, in der die Zahlen ihres von-Baeyer-Deskriptors aufgeführt werden. Bei Trispiro- und höheren Spirosystemen wird jedesmal, wenn ein Spiroatom zum zweiten Mal erreicht wird, dessen Lokant hochgestellt an die entsprechende Zahl für die verbindenden Atome angefügt.^[9]

Beispiele:



Dispiro[4.2.4.2]tetradecan



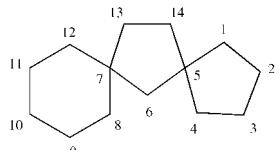
Trispiro[2.2.2.2^9.2^6.2^3]pentadecan

Anmerkung: In früheren Regeln^[5, 6] wurden keine hochgestellten Lokanten verwendet, aber mit der Erweiterung dieses Systems auf verzweigte Spirosysteme (siehe SP-1.5), für deren Benennung hochgestellte Lokanten unbedingt erforderlich sind, ist es klarer, sie für alle Polyspirosysteme mit drei oder mehr Spiroatomen zu verwenden, die mit einem von-Baeyer-Deskriptor benannt werden.

SP-1.4.1

Besteht eine Wahlmöglichkeit bei der Bezifferung, wird der Name gewählt, der die niedrigsten Lokanten für die Spiroatome ergibt.

Beispiel:



Dispiro[4.1.5.2]tetradecan

nicht Dispiro[5.1.4.2]tetradecan

nicht Dispiro[4.2.5.1]tetradecan

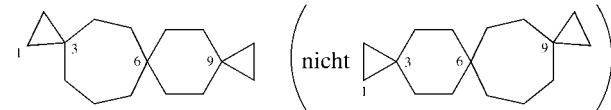
nicht Dispiro[5.2.4.1]tetradecan

(5,7 ist niedriger als 6,8 oder 5,8 oder 6,9)

SP-1.4.2

Besteht weiterhin eine Wahlmöglichkeit bei der Bezifferung, werden die Zahlen des von-Baeyer-Deskriptors in der Reihenfolge ihrer Nennung verglichen. Der Name mit der kleineren Zahl an der ersten unterschiedlichen Stelle wird gewählt.

Beispiel:



Trispiro[2.2.2.2^9.2^6.2^3]hexadecan

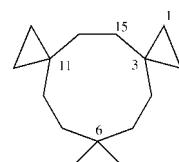
nicht Trispiro[2.2.2.3^6.2^3]hexadecan

(2.2.2.2^9.2^6.2^3 ist niedriger als 2.2.2.3^6.2^3)

SP-1.5

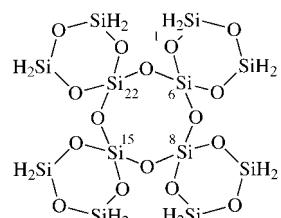
Die Namen verzweigter Polyspirokohlenwasserstoffe, die nur aus Monocyclen aufgebaut sind, ergeben sich aus den Präfixen Trispiro, Tetraspiro usw., die die Gesamtzahl der vorhandenen Spiroatome anzeigen, dem von-Baeyer-Deskriptor, der die Zahl an Kohlenstoffatomen angibt, die an ein Spiroatom gebunden sind oder Spiroatome verbinden, und dem Namen des Stammkohlenwasserstoffs, der der Gesamtzahl der Gerüstatome entspricht. Die Zahlen des Deskriptors werden der Reihe nach aufgeführt, wobei man an einem endständigen Ring beginnt, zum nächsten endständigen Ring voranschreitet und so weiter bis zurück zum ersten Spiroatom; die Zahlen werden durch Punkte getrennt und in eckige Klammern eingeschlossen. Die Verbindung wird in der Reihenfolge beziffert, in der die Zahlen ihres von-Baeyer-Deskriptors aufgeführt werden. Jedesmal, wenn ein Spiroatom zum zweiten Mal erreicht wird, wird dessen Lokant hochgestellt an die entsprechende Zahl für die verbindenden Atome angefügt.^[9]

Beispiele:



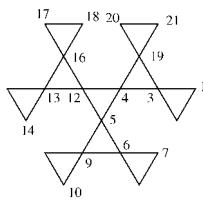
Trispiro[2.2.2.2^11.2^3]pentadecan

Anmerkung: Ohne die hochgestellten Lokanten wäre dieser Name identisch mit dem des zweiten Beispiels in SP-1.4, ebenfalls ohne die hochgestellten Lokanten.

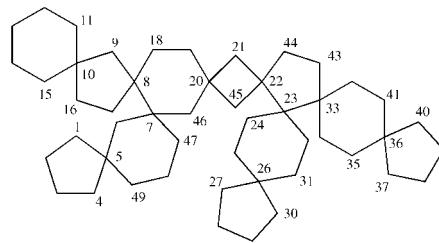


Tetraspiro[5.1.5^8.1.5^15.1.5^22.1^6]dodecasiloxan

Der CAS-Indexname für diese Verbindung hat keine hochgestellten Lokanten, was zur Folge hat, dass mehr als eine Struktur möglich ist.

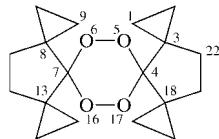


Nonaspido[2.0.0.0.2⁶.0.2⁹.0⁵.0.0.2¹³.0.2¹⁶.0²¹².0⁴.0.2¹⁹.0³]-heicosan

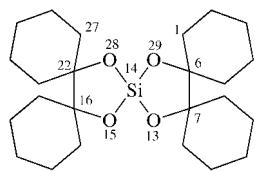


Decaspido[4.1.0.1.5¹⁰.2⁸.2.1.0.2.4²⁶.2²³.0.2.4³⁶.2³³.2²².1²⁰.1⁷.3⁵]-nonatetracontan

Name in Lit. [10]: decaspido[4.1.0(1.5.2)2.1.0(2.4.2)0.2.4.2.2.1.1.3]nonatetracontane



5,6,16,17-Tetraoxahexaspido[2.0.2.0.2⁸.2.2¹³.0⁷.2⁴.0.2¹⁸.2³]-docosan

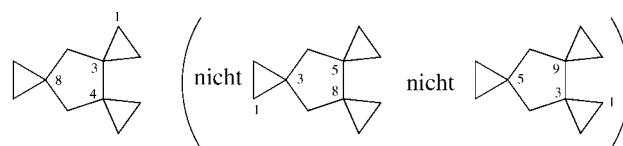


13,15,28,29-Tetraoxa-14-silapentaspido[5.0.5⁷.1.1.5¹⁶.0.5²².1¹⁴.1⁶]nonacosan

SP-1.5.1

Besteht weiterhin eine Wahlmöglichkeit bei der Bezifferung, wird der Name gewählt, der die niedrigsten Lokanten für die Spiroatome ergibt.

Beispiele:

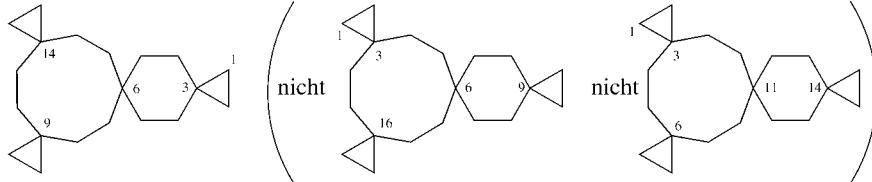


Trispido[2.0.2⁴.1.2⁸.1³]undecan

nicht Trispido[2.1.2⁵.0.2⁸.1³]undecan

nicht Trispido[2.1.2⁵.1.2⁹.0³]undecan

(3,4,8 ist niedriger als 3,5,8 oder 3,5,9)



Tetraspiro[2.2.2.2⁹.2.2¹⁴.2⁶.2³]icosan

nicht Tetraspiro[2.2.2.2⁹.2⁶.2.2¹⁶.2³]icosan

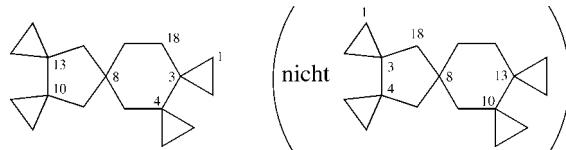
nicht Tetraspiro[2.2.2⁶.2.2.2¹⁴.2¹¹.2³]icosan

(3,6,9,14 ist niedriger als 3,6,9,16 oder 3,6,11,14)

SP-1.5.2

Besteht weiterhin eine Wahlmöglichkeit bei der Bezifferung, werden die Zahlen des von-Baeyer-Deskriptors in der Reihenfolge ihrer Nennung verglichen. Der Name mit der kleineren Zahl an der ersten unterschiedlichen Stelle wird gewählt.

Beispiel:



Pentaspido[2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.1⁸.2³]octadecan

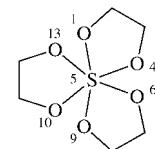
nicht Pentaspido[2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.2⁸.1³]octadecan

(2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.1⁸.2³ ist niedriger als 2.0.2⁴.1.1.2¹⁰.0.2¹³.2⁸.1³)

SP-1.6

Der Name von Ringsystemen, die aus drei Monocyclen mit nur einem Spiroatom (d.h. einem sechsbindigen Spiroatom) aufgebaut sind, ergibt sich aus dem Präfix Spiro, dem von-Baeyer-Deskriptor und dem Namen des Stammkohlenwasserstoffs, der der Gesamtzahl der im Ringsystem vorhandenen Gerüstatome entspricht. Heteroatome werden durch Austauschpräfixe angegeben (siehe SP-1.3) und eine von der Standardbindungszahl abweichende Bindungszahl durch das Symbol $\lambda^{[11]}$ (für Einzelheiten sei auf SP-7 verwiesen). Wenn ein Spiroatom zum wiederholten Mal erreicht wird, wird dessen Nummer als hochgestellter Lokant an die entsprechende Zahl für die verbindenden Atome angefügt.^[9]

Beispiel:

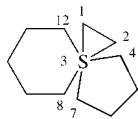


1,4,6,9,10,13-Hexaoxa-5λ⁶-thiaspiro[4.4⁵.4⁵]tridecan

SP-1.6.1

Besteht eine Wahlmöglichkeit, wird ein kleinerer Ring vor einem größeren Ring beziffert.

Beispiel:



3λ⁶-Thiaspiro[2.4³.5³]dodecan

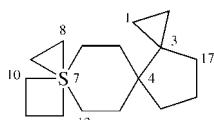
SP-1.7

Für die Benennung von Polyspirosystemen, die drei Ringe mit nur einem Spiroatom enthalten und ausschließlich aus Monocyclen aufgebaut sind, wird eine Kombination der Regeln SP-1.4, SP-1.5 und SP-1.6 verwendet. Besteht eine Wahlmöglichkeit bei der Bezifferung, werden die folgenden Kriterien der Reihe nach angewendet.

SP-1.7.1

Für Spiroatome werden möglichst niedrige Lokanten gewählt.

Beispiel:

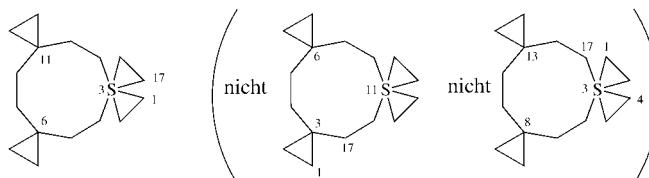


7λ⁶-Thiatrispiro[2.0.2.2⁷.3⁷.2⁴.3³]heptadecan

SP-1.7.2

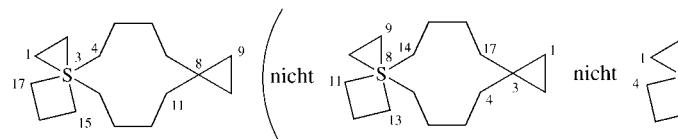
Für Spiroatome, die drei Ringe verbinden, werden möglichst niedrige Lokanten gewählt.

Beispiele:



3λ⁶-Thiatrispiro[2.2.2⁶.2.2¹¹.2³.2³]heptadecan

nicht 11λ⁶-Thiatrispiro[2.2.2⁶.2.2¹¹.2¹¹.2³]heptadecan (3 ist niedriger als 11)
nicht 3λ⁶-Thiatrispiro[2.2³.2.2⁸.2.2¹³.2³]heptadecan (3,6,11 ist niedriger als 3,8,13; siehe SP-1.7.1)



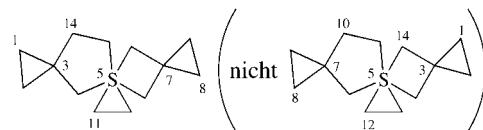
3λ⁶-Thiadispiro[2.4.2⁸.4³.3³]heptadecan

nicht 8λ⁶-Thiadispiro[2.4.2⁸.3⁸.4³]heptadecan (3 ist niedriger als 8)
nicht 3λ⁶-Thiadispiro[2.3³.4.2¹¹.4³]heptadecan (3,8 ist niedriger als 3,11; siehe SP-1.7.1)

SP-1.7.3

Für den von-Baeyer-Deskriptor werden die Zahlen in der Reihenfolge ihrer Nennung möglichst niedrig gewählt.

Beispiel:



5λ⁶-Thiatrispiro[2.1.1.2⁷.1⁵.2⁵.2³]tetradecan

nicht 5λ⁶-Thiatrispiro[2.1.1.2⁷.2⁵.2⁵.1³]tetradecan

(2.1.1.2⁷.1⁵.2⁵.2³ ist niedriger als 2.1.1.2⁷.2⁵.2⁵.1³)

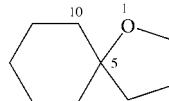
SP-1.8

Besteht wegen Heteroatomen, funktionellen Gruppen oder Substituenten eine Wahlmöglichkeit zwischen Namen oder bei der Bezifferung, werden die folgenden Kriterien der Reihe nach so lange angewendet, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

SP-1.8.1

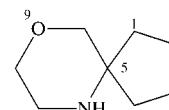
Den Heteroatomen, die durch Austauschpräfixe beschrieben werden, wird ein möglichst niedriger Lokantensatz zugewiesen, wobei die Lokanten der Heteroatome gemeinsam berücksichtigt werden.

Beispiele:



1-Oxaspiro[4.5]decan

nicht 4-Oxaspiro[4.5]decan



9-Oxa-6-azaspiro[4.5]decan

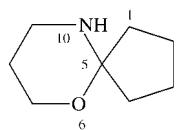
nicht 7-Oxa-10-azaspiro[4.5]decan (6,9 ist niedriger als 7,10)

SP-1.8.2

Möglichst niedrige Lokanten werden den Heteroatomen gemäß der Reihenfolge in den Regeln B-1.1,^[5] RB-1.4,^[12] R-2.3.3.1 und R-9.3^[6] zugewiesen.^[*]

[*] Der Regeltext setzt die Kenntnis der zitierten Regeln voraus. In ihnen ist die Rangfolge der Heteroatome festgelegt. Daraus folgt, dass niedrigere Lokanten zuerst an das ranghöchste Heteroatom, dann an das rangzweithöchste vergeben werden sollen usw. Die Rangfolge der wichtigsten Heteroatome ist O > S > N > P > As > Si > B.

Beispiel:



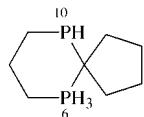
6-Oxa-10-azaspiro[4.5]decan

nicht 10-Oxa-6-azaspiro[4.5]decan (6-Oxa ist niedriger als 10-Oxa)

SP-1.8.3

Atomen mit einer durch das Symbol $\lambda^{[11]}$ ausgedrückten, von der Standardbindungszahl abweichenden Bindungszahl werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen – wenn notwendig in der Reihenfolge abnehmender Bindungszahl, d.h. ein niedrigerer Lokant für λ^5 vor einem niedrigeren Lokanten für λ^3 (siehe auch SP-7).

Beispiel:

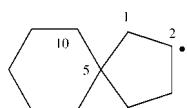


6 λ^5 ,10-Diphosphaspiro[4.5]decan

SP-1.8.4

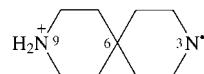
Radikalpositionen oder der Verknüpfungsstelle des Ringsystems, wenn es ein Substituent ist, werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiele:



Spiro[4.5]decan-2-yl

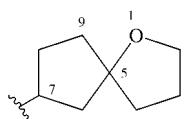
nicht Spiro[4.5]decan-3-yl



3,9-Diazaspiro[5.5]undecan-9-ium-3-yl

nicht 3,9-Diazaspiro[5.5]undecan-3-ium-9-yl

aber



1-Oxaspido[4.4]nonan-7-yl

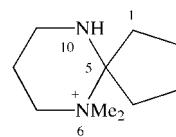
nicht 6-Oxaspido[4.4]nonan-2-yl (siehe SP-1.8.1)

SP-1.8.5

Zentren mit positiver Ladung werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen. (Zu Verbindungen mit ladungstragenden Spiroatomen siehe SP-8.1)[*]

[*] Zentren mit negativer Ladung haben Vorrang vor Zentren mit positiver Ladung (R-4.1, R-5.8.4^[6] und RC-84.1.1^[7]).

Beispiel:



6,6-Dimethyl-6,10-diazaspiro[4.5]decan-6-ium

(bevorzugter Name)

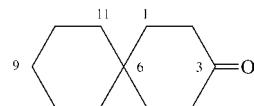
alternativer Name: 6,6-Dimethyl-10-aza-6-azoniaspiro[4.5]decan

nicht 10,10-Dimethyl-6,10-diazaspiro[4.5]decan-10-ium (6-ium ist niedriger als 10-ium)

SP-1.8.6

Der ranghöchsten funktionellen Gruppe werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

Beispiel:



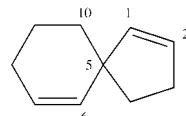
Spiro[5.5]undecan-3-on

nicht Spiro[5.5]undecan-9-on (3 ist niedriger als 9)

SP-1.8.7

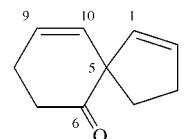
Doppelbindungen werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.[*]

Beispiele:



Spiro[4.5]deca-1,6-dien

nicht Spiro[4.5]deca-1,9-dien (1,6 ist niedriger als 1,9) aber



Spiro[4.5]deca-1,9-dien-6-on

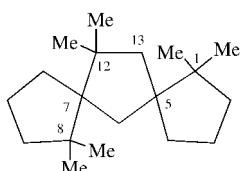
nicht Spiro[4.5]deca-1,6-dien-10-on (6-on ist niedriger als 10-on, siehe SP-1.8.6)

SP-1.8.8

Den mit Präfixen beschriebenen Substituenten werden ohne Rücksicht auf ihre Art möglichst niedrige Lokanten zugewiesen.

[*] Diese Regel ist nicht richtig, da sie Dreifachbindungen unberücksichtigt lässt, die in Spiroverbindungen mit größeren Ringen vorkommen könnten. Wenn Dreifachbindungen vorhanden sind, wird zuerst ein möglichst niedriger Lokantsatz für alle Mehrfachbindungen gemeinsam ermittelt. Erst wenn dann noch eine Wahlmöglichkeit besteht, wird den Doppelbindungen ein möglichst niedriger Lokantsatz zugewiesen (siehe Regel R-3.1.1^[6]).

Beispiel:



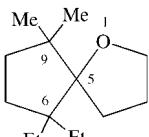
1,1,8,8,12,12-Hexamethyldispiro[4.1.4.2]tridecan

nicht 1,1,8,8,13,13-Hexamethyldispiro[4.1.4.2]tridecan

SP-1.8.9

Den mit Präfixen beschriebenen Substituenten werden möglichst niedrige Lokanten in der Reihenfolge ihrer Nennung zugewiesen.

Beispiel:

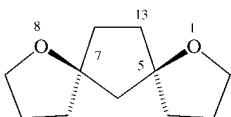


6,6-Diethyl-9,9-dimethyl-1-oxaspiro[4.4]nonan

SP-1.8.10

R-konfigurierten Chiralitätszentren werden möglichst niedrige Lokanten zugewiesen (siehe auch SP-9).

Beispiel:



(5*R*,7*S*)-1,8-Dioxadispiro[4.1.4.2]tridecan

nicht (5*S*,7*R*)-1,8-Dioxadispiro[4.1.4.2]tridecan (*5R* ist niedriger als *7R*)

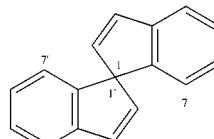
SP-2: Monospiroverbindungen aus zwei identischen polycyclischen Komponenten

SP-2.1

Die Namen von Monospiroverbindungen aus zwei identischen polycyclischen Komponenten (wobei Doppelbindungen und Heteroatome einer Komponente, die nach der von-Baeyer-Nomenklatur benannt wird, ignoriert werden^[*]), ergeben sich aus dem Präfix Spirobi und dem in eckige Klammern eingeschlossenen Namen des Teirlingsystems. Lokanten, die zur Beschreibung des Teirlingsystems erforderlich sind, werden in eckige Klammern eingeschlossen. Die Bezeichnung der polycyclischen Komponente wird beibehalten, wobei ein Lokantensatz Striche erhält. Die Lage des Spiroatoms wird durch den Namen vorangestellte Lokanten

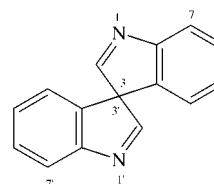
(zuerst der ohne Strich) angegeben. Besteht eine Wahlmöglichkeit, werden die niedrigeren Lokanten gewählt. Wo erforderlich werden die für ein mankudes^[13] System notwendigen Doppelbindungen erst nach dem Zusammenfügen des gesamten Gerüsts eingefügt. Falls indizierter Wasserstoff benötigt wird, um die Lage von Doppelbindungen zu ermitteln, wird er vor den Lokanten für das Spiroatom aufgeführt. Besteht eine Wahlmöglichkeit, werden möglichst niedrige Lokanten für den indizierten Wasserstoff gewählt.

Beispiele:



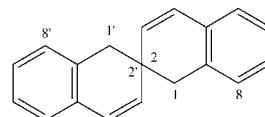
1,1'-Spirobi[inden]

CAS-Indexname: 1,1'-spirobi[1*H*-indene]



3,3'-Spirobi[indol]

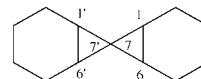
CAS-Indexname: 3,3'-spirobi[3*H*-indole]



1*H*,1'*H*-2,2'-Spirobi[naphthalen]

oder 1*H*,1'*H*-2,2'-Spirobi[naphthalin]^[*]

CAS-Indexname: 2,2'(1*H*,1'*H*)-spirobinaphthalene

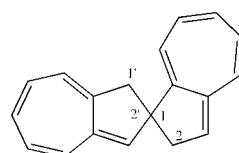


7,7'-Spirobi[bicyclo[4.1.0]heptan]

SP-2.2

Besteht eine Wahlmöglichkeit dafür, welche Komponente die gestrichenen Lokanten erhält, ist der niedrigere Lokant für das Spiroatom ungestrichen.

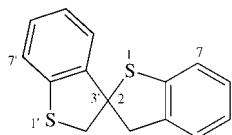
Beispiele:



1'*H*,2*H*-1,2'-Spirobi[azulen]

[*] Diese neue Regel widerspricht dem elementarsten Prinzip der bisherigen Nomenklaturregeln, nach dem bei Unsättigung die Endung -en/-in stets die Endung -an ersetzt, und ist auch nicht mit dem in Regel SP-4 beschriebenen Verfahren vereinbar. Sie macht jedoch deutlich, dass die Spiroatome bei der Bezeichnung Vorrang vor den Mehrfachbindungen haben. Siehe auch die Fußnote zu SP-2.3.

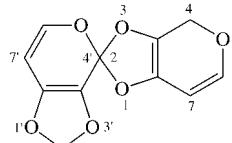
[*] In allen Fällen kann, wenn in Beispielen ..naphthalen.. vorkommt, stattdessen auch ..naphthalin.. verwendet werden.



2'H,3H-2,3'-Spirobi[[1]benzothiophen]

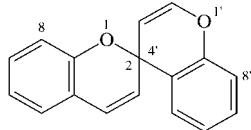
CAS-Indexname: 2,3'(2'H,3H)-spirobi[benzo[b]thiophene]

Anmerkung: Der indizierte Wasserstoff für Position 2' könnte weggelassen werden.



4H-2,4'-Spirobi[[1,3]dioxolo[4,5-c]pyran]

CAS-Indexname: 2,4'-spirobi[4H-1,3-dioxolo[4,5-c]pyran]



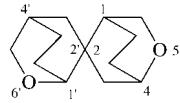
2,4'-Spirobi[chromen]

CAS-Indexname: spiro[2H-1-benzopyran-2,4'-[4H-1]benzopyran]

SP-2.3^[*]

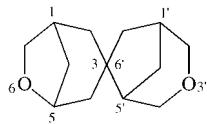
Bei Komponenten, die nach der von-Baeyer-Nomenklatur benannt werden, wird für die Angabe von Heteroatomen die Austauschnomenklatur verwendet. Das Spirosystem wird als gesättigter Kohlenwasserstoff benannt, und die Austauschpräfixe für die Heteroatome stehen vor dem gesamten Spirokohlenwasserstoffnamen. Besteht eine Wahlmöglichkeit, werden möglichst niedrige Lokanten erst dem Spiroatom und danach den Heteroatomen zugewiesen (siehe SP-1.8 für genauere Ausführungen).

Beispiele:



5,6'-Dioxa-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octan]

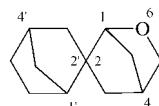
nicht 6,8'-Dioxa-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octan] (5,6'-Dioxa ist niedriger als 6,8'-Dioxa)



3',6-Dioxa-3,6'-spirobi[bicyclo[3.2.1]octan]

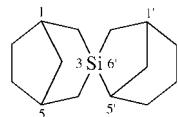
CAS-Indexname: spiro[3-oxabicyclo[3.2.1]octane-6,3'-[6]oxabicyclo[3.2.1]octane]

[*] Diese neue Regel steht im Widerspruch zur Behandlung von Heteroatomen in Regel SP-4. Aus ihr wird jedoch deutlich, dass die Spiroatome analog den Nebenbrücken in der von-Baeyer-Nomenklatur (*Pure Appl. Chem.* **1999**, *71*, 513–529; deutsche Fassung: *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 3423–3432) bei der Bezifferung Vorrang vor den Heteroatomen haben.



6-Oxa-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.1]heptan]

CAS-Indexname: spiro[bicyclo[2.2.1]heptane-2,2'-[6]oxabicyclo[2.2.1]heptane]

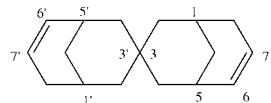


3-Sila-3,6'-spirobi[bicyclo[3.2.1]octan]

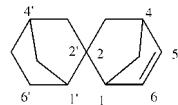
SP-2.4^[*]

Unsättigung in einer Komponente, die nach der von-Baeyer-Nomenklatur benannt wird, wird durch die Endungen -en, -dien usw. außerhalb der eckigen Klammer angegeben, ohne dass die Endung -an des gesättigten Kohlenwasserstoffs in der Klammer wegfällt. Besteht eine Wahlmöglichkeit, werden möglichst niedrige Lokanten in folgender Reihenfolge vergeben: für die Spiroatome, die Austauschpräfixe, die ranghöchsten funktionellen Gruppen und die Doppelbindungen.^[**]

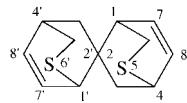
Beispiele:



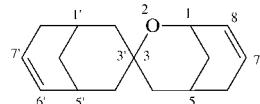
3,3'-Spirobi[bicyclo[3.3.1]nonan]-6,6'-dien



2,2'-Spirobi[bicyclo[2.2.1]heptan]-5-en



5,6'-Dithia-2,2'-spirobi[bicyclo[2.2.2]octan]-7,7'-dien



2-Oxa-3,3'-spirobi[bicyclo[3.3.1]nonan]-6',7-dien

SP-2.5

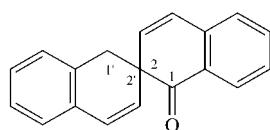
Wenn eine Wahlmöglichkeit für die Bezifferung der Komponenten verbleibt, werden dafür die normalen Bezifferungsregeln angewendet; ungestrichene Lokanten werden identischen gestrichenen Lokanten vorgezogen. (Für genauere Anleitungen siehe SP-1.8. Falls bei der Entscheidung indi-

[*] Siehe Fußnote zu SP-2.1.

[**] Siehe Fußnote zu SP-1.8.7.

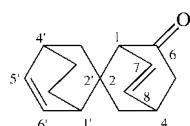
zirter Wasserstoff einbezogen werden muss, sollte dieser zwischen SP-1.8.5 und SP-1.8.6 berücksichtigt werden.)

Beispiele:



1H,1'H-2,2'-Spirobi[naphthalen]-1-on^[*]

Anmerkung: 1H könnte entfallen (was jedoch nicht empfehlenswert ist).



2,2'-Spirobi[bicyclo[2.2.2]octan]-5',7-dien-6-on

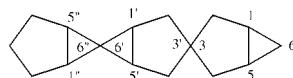
nicht 2,2'-Spirobi[bicyclo[2.2.2]octan]-5,7'-dien-6'-on

SP-3: Drei identische spiroverknüpfte Komponenten^[**]

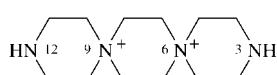
SP-3.1

Dispiroverbindungen mit ausschließlich identischen Komponenten werden benannt, indem das Präfix Dispiroter dem in eckige Klammern eingeschlossenen Namen der Komponente vorangestellt wird. Lokanten, die erforderlich sind, um die Komponente zu beschreiben, werden in eckige Klammern eingeschlossen. Die mittlere Komponente wird mit gestrichenen Nummern beziffert, und die Nummern der Atome der dritten Komponente erhalten je zwei Striche. Die Spiroatome werden durch zwei durch Doppelpunkt getrennte Lokantenpaare vor dem Namen angegeben. Indizierter Wasserstoff wird, falls erforderlich, vor diesen Lokanten aufgeführt.

Beispiele:



3,3':6',6''-Dispiroter[bicyclo[3.1.0]hexan]
aber



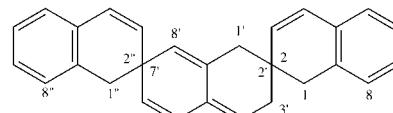
3,6λ⁵,9λ⁵,12-Tetraazadispiro[5.2.5.2]hexadecan-6,9-bis(ylium)
(Zur Benennung von Verbindungen mit ladungstragenden Spiroatomen siehe SP-8.)

Anmerkung: Für dieses Ringsystem wurde auch der Name *N,N'*-Dispirotripiperazinium verwendet.

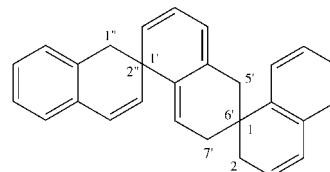
SP-3.2

Besteht eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, wird der niedrigste Lokantensatz für alle Spiroatome gewählt, wobei die Lokanten als in aufsteigender Reihenfolge geordneter Satz verglichen werden und, falls dies nicht zu einer Entscheidung führt, in der Reihenfolge ihrer Nennung im Namen. Falls weiterhin eine Wahlmöglichkeit verbleibt, gelten die Kriterien aus Regel SP-1.8. Indizierter Wasserstoff wird zwischen SP-1.8.5 und SP-1.8.6 berücksichtigt.

Beispiele:



1H,1'H,1''H,3'H-2,2':7',2''-Dispiroter[naphthalen]^[*]

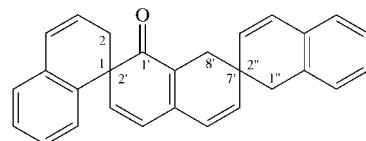


1''H,2H,5'H,7'H-1,6':1',2''-Dispiroter[naphthalen]^[*]

nicht 1'H,1''H,2H,3'H-1,2':5',2''-Dispiroter[naphthalen]

nicht 1H,2''H,5'H,7'H-2,1':6',1''-Dispiroter[naphthalen]

(1,1',2'',6' ist niedriger als 1,2',2'',5' oder 1',1'',2,6')

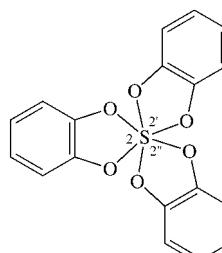


1'H,1''H,2H,8'H-1,2':7'2''-Dispiroter[naphthalen]-1'-on^[*]

SP-3.3

Ringsysteme aus drei identischen Komponenten mit nur einem Spiroatom werden benannt, indem das Präfix Spiroter dem in eckige Klammern eingeschlossenen Namen der Komponente vorangestellt wird. Die drei Lokanten für das Spiroatom werden vor dem Namen angegeben.

Beispiel:



2λ⁶,2',2''-Spiroter[[1,3,2]benzodioxathiol]
(zur Verwendung des Symbols λ siehe SP-7)

[*] Siehe Fußnote zu SP-2.1.

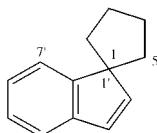
[**] Diese Regel gilt nur für Verbindungen mit polycyclischen Komponenten.

SP-4: Monospiroverbindungen mit unterschiedlichen Komponenten, von denen mindestens eine polycyclisch ist

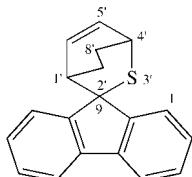
SP-4.1

Solche Monospiroverbindungen werden benannt, indem die Namen der Komponenten in alphabetischer Reihenfolge in eckige Klammern eingeschlossen werden und das Präfix Spiro vorangestellt wird. Die Position des Spiroatoms wird durch die entsprechenden Lokanten bezeichnet, die durch ein Komma voneinander getrennt zwischen den Namen der beiden Komponenten eingefügt werden. Die Lokanten der zweiten Komponente erhalten einen Strich, doch Lokanten, die nur zur Benennung des Teilringsystems erforderlich sind, erhalten keinen Strich, sondern werden in eckige Klammern eingeschlossen. Indizierter Wasserstoff wird, falls benötigt, vor dem gesamten Namen aufgeführt.

Beispiele:

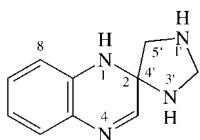


Spiro[cyclopentan-1,1'-inden]

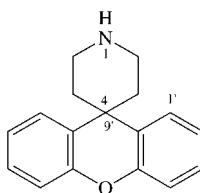


Spiro[fluoren-9,2'-3]thiabicyclo[2.2.2]oct[5]en]

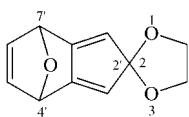
CAS-Indexname: spiro[9H-fluorene-9,3'-2]thiabicyclo[2.2.2]oct[5]ene]



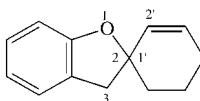
1H-Spiro[chinoxalin-2,4'-imidazolidin]



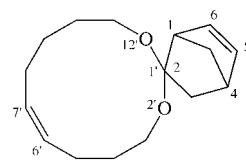
Spiro[piperidin-4,9'-xanthen]



4',7'-Dihydrospiro[1,3-dioxolan-2,2'-4,7]epoxyinden]



3H-Spiro[1-benzofuran-2,1'-cyclohex[2]en]

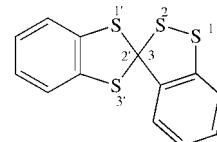


Spiro[bicyclo[2.2.1]hept-5-en-2,1'-2,12]dioxacyclo[6]dodec[6]en]

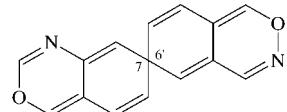
SP-4.2

Wenn die alphabetische Reihenfolge unzulänglich ist, um zwischen zwei Namen zu entscheiden, werden die auf den niedrigeren kursiven Buchstaben- und numerischen Lokanten für die Anellierungsstellen, Heteroatomlokanten und von-Baeyer-Deskriptoren basierenden Prinzipien der Rangfolge von Ringen (siehe Regel C-14.11^[5]) verwendet.

Beispiele:



Spiro[1,2-benzodithiol-3,2'-1,3]benzodithiol] (1,2 vor 1,3)

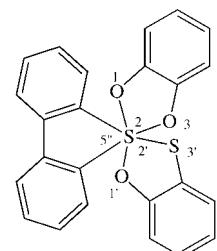


Spiro[3,1-benzoxazin-7,6'-2,3]benzoxazin] (1,3 vor 2,3)

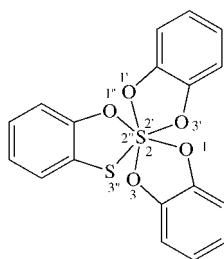
SP-4.3

Ringsysteme aus drei Komponenten, von denen sich mindestens zwei unterscheiden, mit nur einem Spiroatom werden benannt, indem das Präfix Spiro den in alphabetischer Reihenfolge genannten Namen der Komponenten mit den entsprechenden Lokanten für das Spiroatom vorangestellt wird. Für identische Komponenten wird das multiplikative Präfix bis verwendet. Bei drei verschiedenen Komponenten wird die in der Mitte des Namens genannte Komponente in runde Klammern eingeschlossen, um diese besondere Situation hervorzuheben. (Zur Verwendung des Symbols λ siehe SP-7.)

Beispiele:



2λ⁶-Spiro[1,3,2-benzodioxathiol-2,2'-([1,2,3]benzoxadithiol)-2,5''-dibenzo[b,d]thiophen]



2λ⁶-Spiro[bis([1,3,2]benzodioxathiol)-2,2':2',2'']-[1,2,3]benzoxadithiol]^[*]

SP-4.4

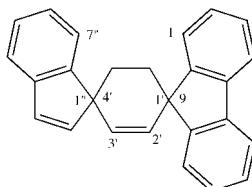
Ringsysteme, die mit Naturstoffen spiroverknüpft sind, können ebenfalls gemäß SP-4.1 benannt werden. Beispiele sind Steroide (Regel 3S-10.3^[14]) und Kohlenhydrate (Regel 2-Carb-35.3^[15]).

SP-5: Unverzweigte Polyspiroverbindungen mit mindestens zwei verschiedenen Komponenten, von denen mindestens eine polycyclisch ist

SP-5.1

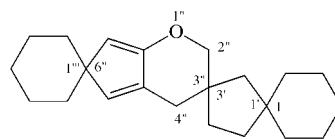
Solche Polyspiroverbindungen werden benannt, indem die Namen der Komponenten, beginnend mit der in der alphabetischen Ordnung früher erscheinenden endständigen Komponente, in der Reihenfolge ihres Auftretens in eckige Klammern eingeschlossen werden. Davor steht ein Präfix, das die Zahl der Spiroatome anzeigt (Dispiro, Trispiro usw.). Lokanten, die sich auf die zuerst genannte Komponente beziehen, sind ungestrichen, die der nächsten erhalten einen Strich usw. Lokanten, die Bestandteil des Namens der zweiten und nachfolgender Komponenten sind, erhalten keine Striche, sondern werden in eckige Klammern eingeschlossen. Die Positionen der Spiroatome werden durch das entsprechende, durch ein Komma getrennte Lokantenpaar zwischen den Namen der betreffenden Teilringsysteme angegeben. Indizierter Wasserstoff wird, falls notwendig, vor dem Gesamt-namen aufgeführt. Besteht eine Wahlmöglichkeit zwischen Namen, wird der mit der in der alphabetischen Ordnung früher erscheinenden zweiten (dann dritten usw.) Komponente gewählt. Multiplikative Präfixe werden für Dispirosysteme mit identischen endständigen Komponenten nicht verwendet.

Beispiele:



Dispiro[fluoren-9,1'-cyclohex[2]en-4',1''-inden]
nicht Dispiro[inden-1,1'-cyclohex[2]en-4',9''-fluoren] (fluoren vor inden)

[*] Die Bezifferung wurde gegenüber der englischen (Druck)ausgabe korrigiert.



2''H,4''H-Trispiro[cyclohexan-1,1'-cyclopentan-3',3''-cyclopenta[b]pyran-6'',1'''-cyclohexan]

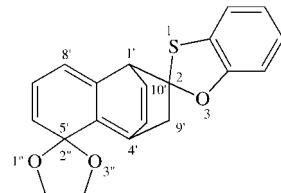
nicht 2''H,4''H-Trispiro[cyclohexan-1,6'-cyclopenta[b]pyran-3',1''-cyclopentan-3'',1'''-cyclohexan] (cyclopentan vor cyclopenta[b]pyran)

Man beachte, dass 2''H hier nicht unbedingt erforderlich ist.

SP-5.2

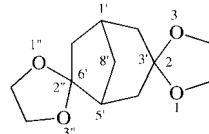
Besteht eine Wahlmöglichkeit bei den Lokanten, werden die Kriterien aus SP-3.2 und danach SP-1.8 so lange angewendet, bis eine eindeutige Entscheidung möglich ist.

Beispiele:



1'H-Dispiro[1,3-benzoxathiol-2,10'-[1,4]ethanonaphthalen-5',2''-[1,3]dioxolan]

nicht 4'H-Dispiro[1,3-benzoxathiol-2,9'-[1,4]ethanonaphthalen-8',2''-[1,3]dioxolan] (2,2'',5',10' ist niedriger als 2,2'',8',9')



Dispiro[1,3-dioxolan-2,3'-bicyclo[3.2.1]octan-6',2''-[1,3]-dioxolan]

nicht Dispiro[1,3-dioxolan-2,6'-bicyclo[3.2.1]octan-3',2''-[1,3]dioxolan] (2,3',6' ist niedriger als 2,6',3',2'')

nicht Dispiro[bicyclo[3.2.1]octan-3,2':6,2''-bis([1,3]dioxolan)]

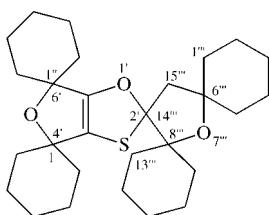
Anmerkung: Die hier empfohlenen Namen ergeben sich mit der traditionellen Methode der Benennung solcher Systeme, aber die Verwendung eines multiplikativen Präfixes wie im dritten Namen des letztgenannten Beispiels ist exakter und eindeutig.^[*]

SP-6: Verzweigte Polyspiroverbindungen mit mindestens einer polycyclischen Komponente

Sind drei oder mehr Komponenten mit einer einzigen Komponente spiroverknüpft, wird das Ringsystem als ein verzweigtes spiroverknüpftes Ringsystem beschrieben. Endständige Komponenten weisen nur ein Spiroatom auf.

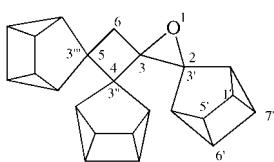
[*] Es ist widersinnig, ausdrücklich auf die Vorteile eines Namens hinzuweisen, der nicht verwendet werden soll. Dieser Name ist gemäß Regel SP-6.1 gebildet, die jedoch nur für verzweigte Polyspiroverbindungen gilt. Vgl. auch den letzten Satz von Regel SP-5.1.

Beispiele:



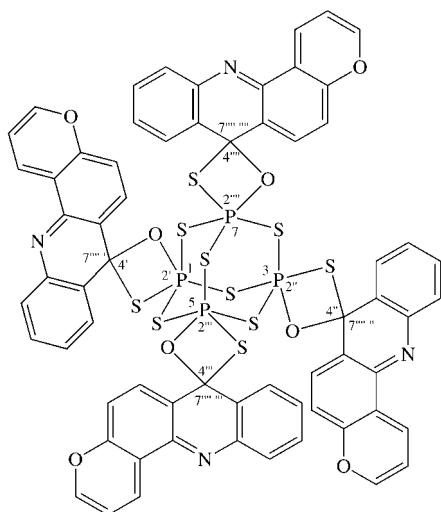
Trispiro{bis(cyclohexan)-1,4':1'',6'-furo[3,4-d][1,3]oxathiol-2',14'''-[7]oxadispiro[5.1.5.2]pentadecan}

CAS-Indexname: pentaspiro[tetracyclohexane-1,2'(5'H):1'',5':1''',4''(6''H):1''''',6''-furan-3'(4'H),2''-furo[3,4-d][1,3]oxathiol]



Trispiro{1-oxaspiro[2.3]hexan-2,3':4,3'':5,3''-tris(tetracyclo-[3.2.0.0^2.7.0^4.6]heptan)}

Anmerkung: Es gibt nur zwei miteinander spiroverknüpfte Monocyclen.



1λ^5,3λ^5,5λ^5,7λ^5-Tetraspiro[tetraspiro[2,4,6,8,9,10-hexathia-1,3,5,7-tetraphosphhaadamantan-1,2':3,2'':5,2''':7,2''''-tetraakis([1,3,2]oxathiaphosphetan)]-4',7''''':4'',7''''':4'',7''''''-4'',7''''''-tetrakis(pyranoc[2,3-c]acridin)]} [Kriterium b, SP-6.4]

CAS-Indexname: octaspiro[2,4,6,8,9,10-hexathia-1,3,5,7-tetraphosphha-tricyclo[3.3.1.1^3.7]decane-1,2λ^5:3,2''λ^5:5,2''λ^5:7,2''''λ^5-tetrakis[1,3,2]oxathiaphosphetane-4',7''''':4'',7''''':4'',7''''''4'',7''''''-tetrakis[7H]pyranoc[2,3-c]acridine]

Anmerkung 1: Der Zwischenraum nach je vier Strichen soll das Erkennen ihrer Gesamtzahl erleichtern.

Anmerkung 2: Zur Verwendung des Symbols λ bei von der Standardbindungszahl abweichender Bindungszahl siehe SP-7.

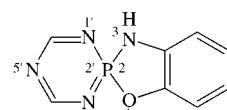
SP-7: Spirosysteme mit Atomen, deren Bindungszahl von der Standardbindungszahl abweicht

SP-7.1

Über die normale Verwendung des Symbols λ^[11] hinaus gibt es bei Spirosystemen eine ganze Reihe von besonderen Situationen. Eine von der Standardbindungszahl abweichende Bindungszahl wird in der üblichen Weise mit dem passenden im Namen vorhandenen Lokanten angegeben oder andernfalls am Anfang des Namens positioniert. Weist das Spiroatom nicht die Standardbindungszahl auf, wird das Symbol dem Lokanten mit der geringeren Zahl an Strichen zugeordnet und außer in den in SP-7.2 beschriebenen Fällen dem Namen vorangestellt. Wo eine Wahlmöglichkeit besteht, wird der indizierte Wasserstoff der zuerst aufgeführten Komponente (ungestrichene Lokanten in einem Spirobi[...]-Namen) zugeordnet.

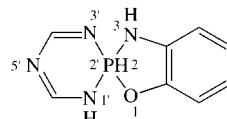
Anmerkung: CAS-Indexnamen unterscheiden sich von den mit den vorgenannten Regeln erhaltenen darin, dass das Symbol λ in einem Nicht-Spirobi[...]-Namen am Lokanten der Spiroverknüpfungsstelle angegeben und dem mit mehr Strichen versehenen Lokanten zugeordnet, vor einem Spirobi[...]-Namen jedoch gesondert aufgeführt wird. Wie weiter unten angemerkt, bezeichnen CAS-Indexnamen nicht immer das markante System.^[13]

Beispiele:



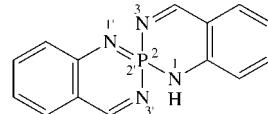
3H-2λ^5-Spiro[1,3,2-benzoxazaphosphol-2,2'-[1,3,5,2]triaza-phosphorin]

CAS-Indexname: spiro[1,3,2-benzoxazaphosphole-2(3H),2'λ^5-[1,3,5,2]-triaza-phosphorine]



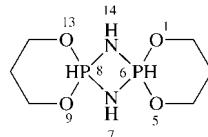
2,3-Dihydro-1'H-2λ^5-Spiro[1,3,2-benzoxazaphosphol-2,2'-[1,3,5,2]triaza-phosphorin]

CAS-Indexname: spiro[1,3,2-benzoxazaphosphole-2,2'λ^5(1'H)-[1,3,5,2]-triaza-phosphorine]

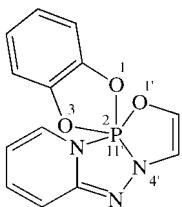


1H-2λ^5,2'-Spirobi[[1,3,2]benzodiazaphosphorin]

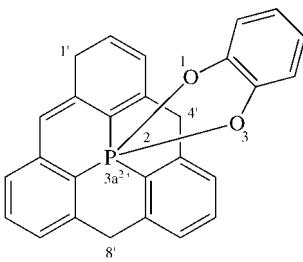
Der CAS-Indexname für die 1',2'-Dihydro-Verbindung ist 2λ^5,2,2'(1H,1'H)-spirobi[1,3,2-benzodiazaphosphorine].



1,5,9,13-Tetraoxa-7,14-diaza-6λ^5,8λ^5-diphosphadispiro-[5.1.5.1]tetradecan



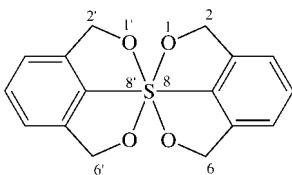
$2\lambda^5$ -Spiro[1,3,2-benzodioxaphosphol-2,11'-[1,3,2]oxaza-phospholo[3',2':2,3][1,2,4,3]triazaphospholo[4,5-a]pyridin]



$1'H,4'H,8'H-2\lambda^5$ -Spiro[1,3,2-benzodioxaphosphol-2,3a^{2'}-[3a²]phosphadibenzo[cd,mn]pyren]

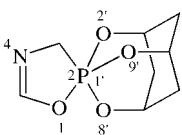
CAS-Indexname: spiro[1,3,2-benzodioxaphosphole-2,13 λ^5 -[1H,4H,8H]-benzo[1,9]phosphinolizino[3,4,5,6,7-def]acridophosphine]

Anmerkung: Der Lokant für das Phosphoratom ist hier gemäß der IUPAC-Nomenklatur für anellierte Ringsysteme, Regel FR-5.5.2,^[16] angegeben.



$2H,2'H,6H,6'H-8^6,8'$ -Spirobi[[1,2]oxathiolo[4,3,2-hi][2,1]-benzoxathiol]^[*]

Der CAS benennt diese Verbindung als ein oktaedrisches Schwefelderivat.



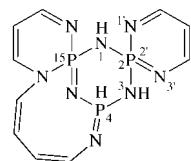
$3H-2\lambda^5$ -Spiro[1,4,2-oxazaphosphol-2,1'-[2,8,9]trioxa[1]-phosphaadamantan] (bevorzugter Name)
alternativer Name: $3H-2\lambda^5$ -Spiro[1,4,2-oxazaphosphol-2,1'-[2,8,9]trioxa[1]phosphatricyclo[3.3.1.1^{3,7}]decan]

SP-7.2

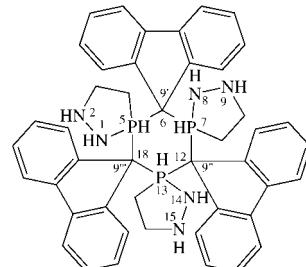
Ist das Symbol λ erforderlich, um eine Komponente zu benennen, wird es in der üblichen Weise im Namen der Komponente aufgeführt.

[*] Die Bezifferung wurde gegenüber der englischen (Druck)ausgabe korrigiert.

Beispiele:



$1H,3H-2\lambda^5$ -Spiro[4 λ^5 ,15 λ^5 -azeno[1,3,2]diazaphosphinino-[1,2-a][1,3,5,7,2,4,6]tetraazatriphosphacycloundecin-2,2'-[1,3,2]diazaphosphinin]



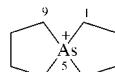
Trispiro{1,2,8,9,14,15-hexaaza-5 λ^5 ,7 λ^5 ,13 λ^5 -triphosphatrispiro[4.1.4⁷.1.4¹³.1]octadecan-6,9':12,9":18,9'''-tris(fluoren)}
(Hier wurde erst Regel SP-6.4 und anschließend Regel SP-6.1 angewendet.)

CAS-Indexname: trispiro[1,2,8,9,14,15-hexaaza-5 λ^5 ,7 λ^5 ,13 λ^5 -triphosphatrispiro[4.1.4.1.4.1]octadecane-6,9':12,9":18,9'''-tris[9H]fluorene]

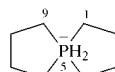
SP-8: Verbindungen mit ladungstragendem Spiroatom

Die bevorzugte Methode zur Benennung solcher Spiroverbindungen ist, eine von der Standardbindungszahl abweichende Bindungszahl für das Spiroatom anzugeben und das Ion durch das entsprechende subtraktive oder additive Suffix zu benennen.^[7] In alternativen Methoden werden Austauschpräfixe für ladungstragende Atome (siehe R-5.8.2 und R-5.8.3^[6]) verwendet oder sie in den Namen der Komponenten des Spirosystems ausgedrückt.

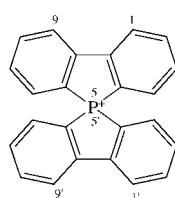
Beispiele:



$5\lambda^5$ -Arsaspiro[4.4]nonan-5-ylium (bevorzugter Name)
alternativer Name: 5-Arsoniaspiro[4.4]nonan



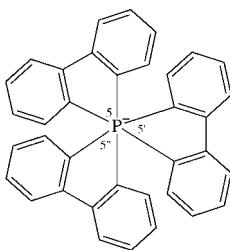
$5\lambda^5$ -Phosphaspiro[4.4]nonan-5-uid (bevorzugter Name)
alternativer Name: 5 λ^5 -Phosphanuidaspiro[4.4]nonan



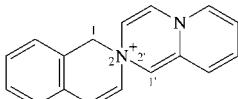
$5\lambda^5,5'$ -Spirobi[benzo[b]phosphindol]-5-ylium
(bevorzugter Name)

alternative Namen: 9-Phosphonia-9,9'-spirobi[fluoren]
oder 5,5'-Spirobi[benzo[b]phosphindolium]

CAS-Indexname: 5,5'-spirobi[5H-dibenzophospholinium]

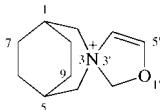
 $5\lambda^7,5',5''$ -Spiroter[benzo[b]phosphindol]-5-id

Die Stammverbindung dieses Ions wurde vom CAS früher $5,5',5''$ -dispirotri[5H-dibenzophosphole] genannt, wird aber jetzt als ein oktaedrischer Komplex, tris([1,1'-biphenyl]-2,2'-diyl)phosphate(1-), benannt.



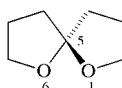
1H-2λ⁵-Spiro[isoquinolin-2,2'-pyrido[1,2-a]pyrazin]-2-ylium

CAS-Indexname: spiro[isoquinoline-2(1H),2'-[2H]pyrido[1,2-a]pyrazinum]

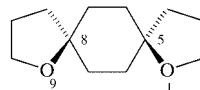
2',3'-Dihydro-3λ⁵-spiro[3-azabicyclo[3.2.2]nonan-3,3'-[1,3]oxazol]-3-ylium^[*]

oder 3λ⁵-Spiro[3-azabicyclo[3.2.2]nonan-3,3'-[1,3]oxazol]-3(2H)-ylium^[*]

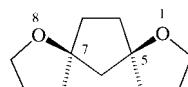
CAS-Indexname: spiro[3-azabicyclo[3.2.2]nonane-3,3'(2H)-oxazolium]



(S)-1,6-Dioxaspiro[4.4]nonan

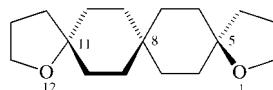


cis-1,9-Dioxadispiro[4.2.4.2]tetradecan^[*]
oder 1r,9c-Dioxadispiro[4.2.4.2]tetradecan^[**]

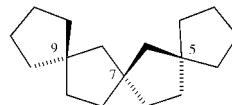
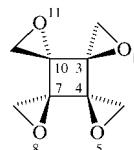


(5R,7S)-1,8-Dioxadispiro[4.1.4.2]tridecan (bevorzugter Name)

oder cis-1,8-Dioxadispiro[4.1.4.2]tridecan^[*]
oder 1r,8c-Dioxadispiro[4.1.4.2]tridecan^[**]

(5(11)R_a)-1,12-Dioxatrispiro[4.2.2.4¹¹.2⁸.2⁵]nonadecan

Anmerkung: Die Konfiguration ist mit einem zusammengesetzten Lokanten angegeben, um die Chiralitätsachse anzuzeigen.

(R)-Trispiro[4.1.1.4⁹.2⁷.2⁵]heptadecan1r,5c,8c,11t-Tetraoxatetraspiro[2.0.2⁴.0.2⁷.0.2¹⁰.0³]dodecan

Anmerkung: Nach den Regeln E-2.3.3^[5] und R-7.1.1^[6] müsste man r1,c-5,c-8,t-11-Tetraoxa... verwenden. Hier wurde jedoch der im „Beilstein“^[18] geübten Praxis gefolgt, da diese kürzer und klarer ist. Bei der Überarbeitung von Abschnitt E der IUPAC-Regeln (stereochemische Bezeichnungsweisen) ist der Wechsel zu dieser Schreibweise vorgesehen.

[*] Nach den Regeln E-2.3.2 bis E-2.3.4^[5] ist die Verwendung des Stereodeskriptors *cis* für diese Verbindung nicht zu rechtfertigen. Seine Verwendung entspricht jedoch der in den *Chemical Abstracts* geübten Praxis, für Ringverbindungen mit drei oder vier Substituenten an nur zwei Ringatomen die Deskriptoren *cis* und *trans* anstelle der dafür vorgesehenen, aber wenig gebräuchlichen Deskriptoren *seqcis* und *seqtrans* („Spezifikation der molekularen Chiralität“: R. S. Cahn, C. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem.* **1966**, *78*, 413–447; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1966**, *5*, 385–415 (511)) zu verwenden.

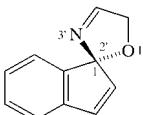
[**] Dieser gemäß Regel E-2.3.4^[5] gebildete Name wurde in Analogie zum letzten Beispiel aus Regel SP-9.1 eingefügt.

SP-9: Beschreibung der Konfiguration

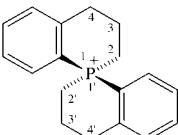
SP-9.1

Die Konfiguration tetraedrisch koordinierter Zentren wird angegeben, wie in Abschnitt E^[5] und Regel R-7^[6] beschrieben (siehe auch SP-1.8.10). Obwohl man mit diesen Regeln in den meisten Fällen klar kommt, gibt es einige, für die Abschnitt E^[5] unzureichend ist. (Für weitere Einzelheiten siehe [17].)

Beispiele:



(R)-5H-Spiro[inden-1,2'-[1,3]oxazol]



(S)-3,3',4,4'-Tetrahydro-2H,2'H-1λ⁵,1'-spirobi[phospholin]-1-ylium (bevorzugter Name)

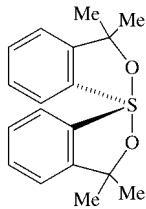
alternativer Name: (S)-3,3',4,4'-Tetrahydro-2H,2'H-1-phosphonia-1,1'-spirobi[naphthalen]

[*] Da zur Bildung des Namens von formal fünfbindigem Stickstoff ausgegangen wird, mußte der in der englischen (Druck)ausgabe aufgeführte Name korrigiert werden.

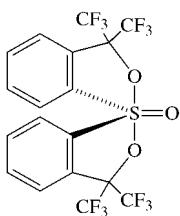
SP-9.2

Die Konfiguration nichttetraedrisch koordinierter Zentren wird nach der Methode der Koordinationsnomenklatur (siehe I-2.2.3.2, I-10.5 und I-10.7^[19]) angegeben.

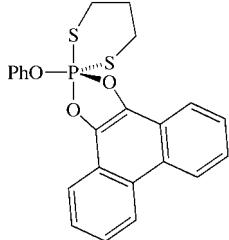
Beispiele:



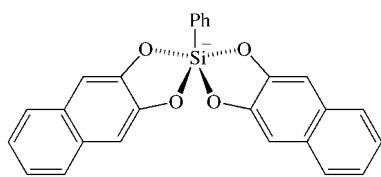
(SS-4-11'-A)-3,3,3',3'-Tetramethyl-3H,3'H-1λ⁴,1'-spirobi-[[2,1]benzoxathiol]^[*]



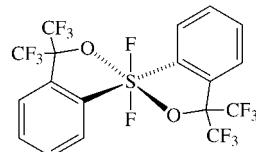
(TBPY-5-11'-A)-1-Oxo-3,3,3',3'-tetrakis(trifluormethyl)-3H,3'H-1λ⁶,1'-spirobi-[[2,1]benzoxathiol]
oder (TBPY-5-11'-A)-3,3,3',3'-Tetrakis(trifluormethyl)-3H,3'H-1λ⁴,1'-spirobi-[[2,1]benzoxathiol]-1-oxid



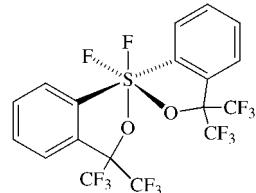
(TBPY-5-12-C)-2-Phenoxy-2λ⁵-spiro[1,3,2-dithiaphosphinan-2,2'-phenanthro[9,10-d][1,3,2]dithiaphosphol]



(SPY-5-21)-2-Phenyl-2,2'-spirobi[naphtho[2,3-d][1,3,2]di-oxasilol]-2-uid



(OC-6-12)-1,1-Difluor-3,3,3',3'-tetrakis(trifluormethyl)-3H,3'H-1λ⁶,1'-spirobi-[[2,1]benzoxathiol]



(OC-6-22-A)-1,1-Difluor-3,3,3',3'-tetrakis(trifluormethyl)-3H,3'H-1λ⁶,1'-spirobi-[[2,1]benzoxathiol]

Anmerkung: In den Stereodeskriptoren der letzten drei Beispiele könnten 21, 12 bzw. 22 durch 21', 12' bzw. 22' ersetzt werden. Dies ist jedoch nicht erforderlich, da keine weiteren Isomere zu unterscheiden sind.

- [1] „Systematik und Nomenklatur bicyclischer Kohlenwasserstoffe“: A. Baeuer, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1900**, *33*, 3771–3775. (Obwohl er seine Veröffentlichungen immer nur unter Baeuer publizierte, wurde er stets in der ehrenvollen Form als von Baeuer zitiert.)
- [2] „Über die Nomenklatur der Spirane“: D. Radulescu, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1911**, *44*, 1023–1026.
- [3] „Proposed international rules for numbering organic ring systems“: A. M. Patterson, *J. Am. Chem. Soc.* **1925**, *47*, 543–561; „The nomenclature of parent ring systems“: A. M. Patterson, *J. Am. Chem. Soc.* **1928**, *50*, 3074–3087; A. M. Patterson, L. T. Capell, *The Ring Index*, Reinhold, New York, **1940**.
- [4] „The formation and stability of spiro-compounds. Part I. spiro-Compounds from cyclo-hexane“: R. M. Beesley, C. K. Ingold, J. F. Thorpe, *J. Chem. Soc.* **1915**, 1080–1106. (Dies ist die älteste Veröffentlichung, in der dieses System verwendet wird, allerdings ohne explizit auf die Nomenklatur einzugehen.)
- [5] *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H, 1979 edition* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Pergamon, Oxford, **1979**; deutsche Ausgabe: *Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie, Bd. 1. Internationale Union für Reine und Angewandte Chemie (IUPAC), Regeln für die Nomenklatur der organischen Chemie* (Hrsg.: Deutscher Zentralausschuss für Chemie), *Abschnitte A und B*, Verlag Chemie, Weinheim, **1975**, *Abschnitt F*, Verlag Chemie, Weinheim, **1978**, und *Abschnitt C*, VCH, Weinheim, **1990**.
- [6] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Organischen Chemie, eine Einführung* (Hrsg.: G. Kruse), VCH, Weinheim, **1997**.
- [7] „Revised nomenclature for radicals, ions, radical ions and related species“: *Pure Appl. Chem.* **1993**, *65*, 1357–1455; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [8] *Index Guide*, Appendix IV (¶ 156), Chemical Abstracts Service, **1997**.
- [9] Diese Regel basiert auf einem Vorschlag von Andrey Yerin, ACD, Moskau.
- [10] „Resolution of ambiguities in the nomenclature of spiro ring systems“: J. E. Rush, L. J. White, *J. Chem. Soc.* **1970**, *10*, 195–204.
- [11] „Treatment of variable valence in organic nomenclature (Lambda convention)“: *Pure Appl. Chem.* **1984**, *56*, 769–778; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [12] „Revision of the extended Hantzsch–Widman system of nomenclature for heteromonocycles“: *Pure Appl. Chem.* **1983**, *55*, 409–416;

[*] Im englischen Original stand der Stereodeskriptor (TBPY-4-11'-A). Er wurde in (SS-4-11'-A) geändert, da keine trigonal-bipyramidalen Strukturen vorliegen. Zur Ermittlung des Polyedersymbols für die geometrische Anordnung von koordinierenden Atomen um ein Zentralatom werden nichtbindende Elektronenpaare nicht berücksichtigt (analog ergibt sich beispielsweise die trigonal-pyramidalen Strukturen von Ammoniak oder Sulfoxiden). Das Polyedersymbol SS-4 ist abgeleitet von dem englischen Wort „see-saw“ für Wippe.

<http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>; eine gekürzte deutsche Fassung ist in Lit. [6], S. 47–50 (Regel R-2.3.3.1) zu finden.

[13] „Glossary of class names of organic compounds and reactive intermediates based on structure“: *Pure Appl. Chem.* **1995**, *67*, 1307–1375; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>. Mankud (engl.: mancude) ist ein Kunstwort und bedeutet „die maximale Anzahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthaltend“.

[14] „Nomenclature of Steroids“: *Eur. J. Biochem.* **1989**, *186*, 429–458; *Pure Appl. Chem.* **1989**, *61*, 1783–1822; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>; *Dictionary of Steroids* (Hrsg.: R. A. Hill, D. N. Kirk, H. L. J. Makin, G. M. Murphy), Chapman and Hall, London, **1991**, S. XXX–LIX; *Biochemical Nomenclature and Related Documents* (Hrsg.: IUBMB), 2. Aufl., Portland Press, London, **1992**, S. 192–221.

[15] „Nomenclature of carbohydrates“: *Adv. Carbohydr. Chem. Biochem.* **1997**, *52*, 43–177; *Carbohydr. Res.* **1997**, *297*, 1–90; *J. Carbohydr.* **1997**, *16*, 1191–1280; *Pure Appl. Chem.* **1996**, *68*, 1919–2008; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.

[16] „Nomenclature of fused and bridged fused ring systems“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, *70*, 143–216; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.

[17] „Grundlagen des CIP-Systems und Vorschläge für eine Revision“: V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem.* **1982**, *94*, 614–631; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1982**, *21*, 567–583.

[18] *Beilstein Handbook of Organic Chemistry*, 4. Aufl., fünftes Ergänzungswerk, Band 18, Teilband 1, **1986**, S. LXIII–LXXVI.

[19] *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990* (Hrsg.: IUPAC), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1990**; zweiter, korrigierter Nachdruck **1992**; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Anorganischen Chemie, Deutsche Fassung der Empfehlungen 1990* (Hrsg.: W. Liebscher), VCH, Weinheim, **1994**; korrigierte Ausgabe: **1995**.