

Nomenklatur markierter organischer Verbindungen

VON K.-H. SEGEL

Inhaltsübersicht

Es wird ein Vorschlag zur Benennung markierter organischer Verbindungen für das deutschsprachige Schrifttum gemacht. Dieser Vorschlag stützt sich auf die Richtlinien der Internationalen Union für reine und angewandte Chemie.

Die mit Nucliden¹⁾ (Isotopen) markierten organischen Verbindungen werden in der Literatur nicht einheitlich benannt. Schon die Bezeichnung der Nuclide (Isotope) ist verschieden. Während die angelsächsischen Zeitschriften die Massenzahl rechts oben vom Element-Symbol (z. B. C¹⁴) bevorzugen, wird in der übrigen Literatur meist die linke Seite (z. B. ¹⁴C) benutzt. Das letztere hat eine gewisse Berechtigung, weil die rechte, obere Seite für den Ladungszustand (z. B. HCOO⁻) vorgesehen ist²⁾. Außerdem trägt diese Bezeichnung der ursprünglichen Formulierung der Isotope durch ihre Entdecker Rechnung. Aus diesem Grunde sollte man sich der Bezeichnung,

^BA

A = Element-Symbol

B = Massenzahl,

anschließen, die auch der XV. Kongreß der Internationalen Union für Chemie (Amsterdam 1949) festgelegt hat.

Aber auch die Namen der markierten organischen Verbindungen sind unterschiedlich und manchmal unexakt:

Z. B. ¹⁴ C-Oxalsäure ³⁾	Brenztraubensäure-2-C ¹⁴ ⁵⁾
¹⁴ C ₍₁₎ -Isochinolin ⁴⁾	4-Amino-benzoesäure-[2,6- ¹⁴ C] ⁶⁾
¹⁴ C _(COOH) -Veratrumsäure ⁴⁾	2-[α- ¹⁴ C]-6-Diallylphenyl-allyläther ⁷⁾ .

1) Eine Kernart heißt Nuclid. Das Wort Isotop sollte nur dann benutzt werden, wenn man eine Beziehung zu anderen Isotopen des gleichen Elements ausdrücken will. Ursprünglich galt Nuclid nur für radioaktive Substanz. („Kernbausteine“ werden „Nucleonen“ genannt.) W. H. WESTPHAL, Physikalisches Wörterbuch, Bd. 2, S. 125, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1952; ULLMANN'S Encyklopädie d. techn. Chemie, 3. Aufl., Bd. 9, S. 86, München-Berlin 1957.

2) Festlegung der Intern. Union f. reine u. angew. Chemie und Vorschlag von W. OSTWALD. H. RÖMPP, Chemielexikon, 4. Aufl., Bd. 1, S. 2082, Stuttgart 1958.

³⁻⁷⁾ s. S. 300.

S. L. THOMAS und H. S. TURNER⁸⁾ veröffentlichten einen Vorschlag zur Benennung, dessen Grundgedanken G. KERSAINT⁹⁾ benutzte, um Nomenklatur-Regeln über die Französische Chemische Gesellschaft (Kommission für Nomenklatur der organischen Chemie) der entsprechenden Kommission der Internationalen Union für reine und angewandte Chemie (Union Internationale de Chimie Pure et Appliquée) in Paris zu unterbreiten.

Die hier vorgetragene Meinung wertet diese Richtlinien für das deutschsprachige Schrifttum aus und ergänzt sie in Zweifelsfällen.

A. Eindeutig markierte organische Verbindungen

Für die Benennung unterscheidet man grundsätzlich zwei Gruppen: Entweder das markierte Element gehört einer funktionellen Gruppe (z. B. $-\text{NH}_2$, $-\text{COOH}$) an oder nicht.

1. Das oder die markierten Elemente gehören keiner funktionellen Gruppe an

§ 1. Eine Verbindung kann ein oder mehrere markierte Elemente enthalten. Wie in der organischen Literatur üblich¹⁰⁾, muß man daher ihre Zahl und ihre Stellung benennen. Man benutzt hierzu die Formel:

$$-(a, b \dots - {}^B A_n)$$

A = Element-Symbol

B = Massenzahl

n = Anzahl der gleichen Nuclide (Isotope)

a, b ... = Stellung der markierten Elemente.

Die vielfach benutzte eckige Klammer ist nicht hinreichend begründet. Die runde Klammer dagegen erleichtert ein Schreiben mit den üblichen Schreibmaschinensystemen.

Das in diese Formel gekleidete Nuclid (Isotop) wird an den Stammnamen der Verbindung gehängt.

³⁾ H. GÖTTE, R. URETZ u. H. BADDENHAUSEN, *Angew. Chem.* **69**, 561 (1957).

⁴⁾ Zitiert im *Chem. Zbl.* **129**, 5635 (1958). Im Original: Isochinolin-1- C^{14} und C^{14} -Veratrumssäure V. R. SHRINIVASAN u. F. TURBA, *Biochem. Z.* **327**, 362 (1956).

⁵⁾ U. DREHMANN u. H.-J. BORN, *J. prakt. Chem.* [4], **5**, 200 (1957).

⁶⁾ F. KORTE u. H. BARKEMEYER, *Chem. Ber.* **90**, 2739 (1957).

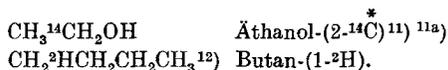
⁷⁾ W. HAEGELE u. H. SCHMID, *Helv. chim. Acta* **41**, 657 (1958).

⁸⁾ S. L. THOMAS u. H. S. TURNER, *Quart. Rev.* **7**, 407 (1953).

⁹⁾ G. KERSAINT, *Bull. Soc. chim. France* [5], **24**, 53 (1957).

¹⁰⁾ z. B. 2,2-Dimethylbutan, Cyclohexa-1,3-dien.

Beispiele:



Das manchmal benutzte D für ^2H und T für ^3H wird der Einheitlichkeit wegen nicht empfohlen.

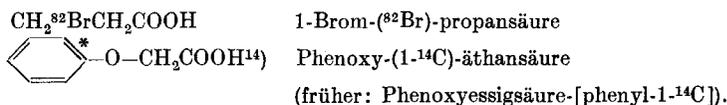
§ 2. Ist die Stellung eindeutig, so bleibt deren Angabe weg.

Beispiele:



§ 3. Tragen Seitenketten oder andere vom Stamm gesondert benannte Teile des Moleküls das Isotop, so wird die obige Formel (s. § 1) diesen Teilen angehängt.

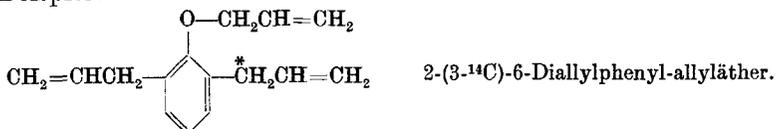
Beispiele:



Die frühere Bezeichnung mit Zusatzbemerkungen, wie $-\text{[phenyl-}^{14}\text{C]}$, $-\text{[keto-}^{14}\text{C]}$, erübrigt sich damit und sollte nicht mehr benutzt werden.

§ 4. Bei mehreren gleichen Molekülteilen, von denen nur einer oder wenige ein oder mehrere markierte Elemente enthalten, kann man die Markierungsformel (s. § 1) gleich hinter die Stellungsangabe setzen.

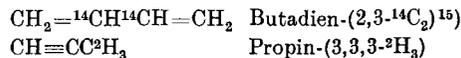
Beispiel:



Die Stellungsbenennung mit griechischen Buchstaben (hier z. B. 2-(α - ^{14}C)-6-Diallylphenyl-allyläther) ist ebenfalls gestattet.

§ 5. Ist das gleiche markierte Element mehrere Male im Molekül, so fügt man deren Anzahl als Index an das Symbol.

Beispiele:



¹¹⁾ Gesprochen: Äthanol-zwei-ce-vierzehn (dies gilt als Beispiel).

^{11a)} Will man ausdrücklich kenntlich machen, daß es sich um ein radioaktives Nuclid (Isotop) handelt, so kann man ein Sternchen über dem Element-Symbol anbringen.

¹²⁾ In den Formeln (Summenformeln) schreibt man bei gleichen Elementen erst das übliche Symbol und dann die Symbole der Isotope in der Reihenfolge ihrer Massenzahlen.

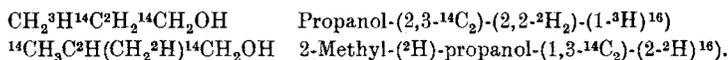
¹³⁾ Siehe § 5.

¹⁴⁾ Bei Strukturbildern werden die markierten Stellen mit einem Stern bezeichnet.

¹⁵⁾ Gesprochen: Butadien-zwei-drei-ce-vierzehn (dies gilt als Beispiel).

§ 6. Sind mehrere, ungleiche Nuclide (Isotope) in der Verbindung, so werden sie getrennt in alphabetischer Reihenfolge (bei Isotopen in der Reihenfolge ihrer Massenzahlen), mit Bindestrich verknüpft. Die Benennung richtet sich nach den vorangegangenen Paragraphen.

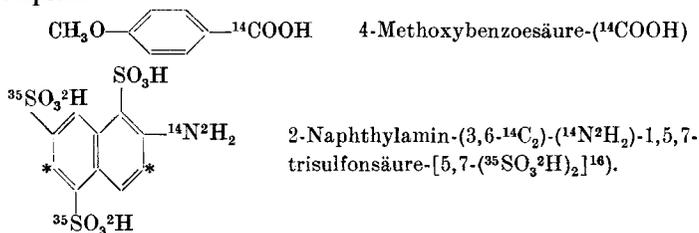
Beispiele:



2. Das oder die markierten Elemente gehören einer funktionellen Gruppe an

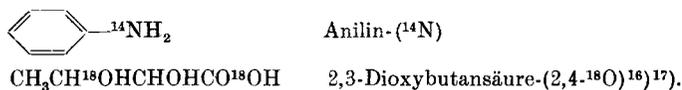
§ 7. Gehören ein oder mehrere markierte Elemente einer funktionellen Gruppe an, so wird diese an Stelle des Atomsymbols in die obige Formel (s. § 1) geschrieben. Die Benennung und Beschriftung erfolgt nach den vorangegangenen Regeln, wobei die funktionellen Gruppen alphabetisch den Elementen folgen.

Beispiele:



§ 8. Die Ausdrücke in den Klammern sollen auf die Bezeichnung des Nuclids (Isotops) verringert werden, wenn sich dadurch keine Zweideutigkeit bildet.

Beispiele:



B. Mehrdeutig oder unbekannt markierte organische Verbindungen

§ 9. Ist die Lage ein oder mehrerer Nuclide (Isotope) mehrdeutig, dann wird dies in der Bezeichnung mit „od.“ (= oder) ausgedrückt. Im übrigen gelten die vorhergehenden Richtlinien des Abschnittes A.

¹⁶) Konstruiertes Beispiel.

¹⁷) Die Position des markierten Sauerstoffs ist in der Carboxylgruppe durch Resonanz unbestimmt. Es ist deshalb gestattet, diese verkürzte Bezeichnungsweise anzuwenden.

Beispiele:



oder



Cyclohexen-(3,4 od. 4,5- $^{14}\text{C}_2$)¹⁶).

§ 10. Bei biosynthetischen oder physikalischen (z. B. „Tritium-recoil method“¹⁸) Markierungsmethoden kann das Nucleid (Isotop) auf allen Plätzen wahllos verteilt sein oder sich spezifisch an bestimmten, nicht bekannten Stellen konzentrieren. Man schreibt dann für die Stellungsangabe ein u.

U bedeutet: Gleichmäßig verteilt¹⁹).

Beispiele:

Benzoessäure-(u- ^3H)

Digitoxin-(u- ^{14}C).

Frl. S. CALDELARI, Mendrisio (Italien), sei für die freundliche Mithilfe gedankt.

¹⁸) K. E. WILZBACH, J. Amer. chem. Soc. **79**, 1013 (1957).

¹⁹) Englisch: Uniformly.

Berlin-Buch, Deutsche Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Arbeitsstelle für Kreislaufforschung.

Bei der Redaktion eingegangen am 9. Juli 1958.