

# Benennung (Nomenklatur) von Alkanen

zusammengestellt von W. Habelitz-Tkotz  
in Anlehnung an  
Galvani 3, Oldenbourg-Verlag, S. 34 + 35

# Historische Entwicklung

- ursprünglich: Trivialnamen für viele Stoffe,  
z. B. Wasser, Harnstoff, Ammoniak, Methan
- seit 1892: Systematische (Genfer) Nomenklatur
- heute gültige Nomenklatorsysteme:
  - CA „chemical abstracts“  
(seit 1907, American chemical society)
  - **IUPAC** => Abi!  
(seit 1919, International Union of Pure and Applied Chemistry)

# Benennung unverzweigter Alkane

- Endsilbe „-an“
- 1-4 C-Atome: Trivialnamen  
Methan, Ethan, Propan, Butan
- Ab 5 C-Atome: Ableitung von lat. /griech. Zahlwörtern

1 Hen / Un	10 Deca
2 Do	20 (Ei)Cosa
3 Tri	30 Triaconta
4 Tetra	40 Tetraconta
5 Penta	50 Pentaconta
6 Hexa	60 Hexaconta
7 Hepta	70 Heptaconta
8 Octa	80 Octaconta
9 Nona	90 Nonaconta

Bsp.:  $C_{11}H_{24}$       Undecan

$C_{20}H_{42}$       Eicosan

$C_{32}H_{66}$       Do-tria-contan

# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 1

1. Hauptkette festlegen => hinterer Teil des Namens

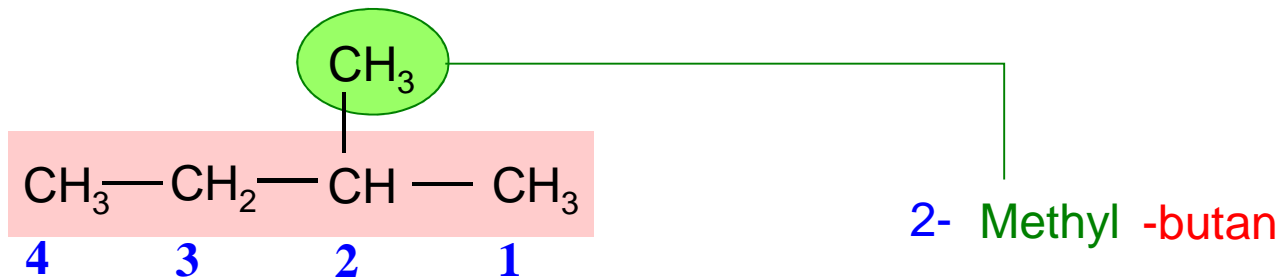
- längste Kette

2. Seitenketten (Alkylgruppen) benennen => „-an“ durch „-yl“ ersetzen

3. Durchnummerieren der Hauptkette

=> Positionsnummer der Seitenkette voranstellen + Bindestrich

- Seitenkette mit niedrigster Nummer



# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 2

1. Hauptkette festlegen => hinterer Teil des Namens

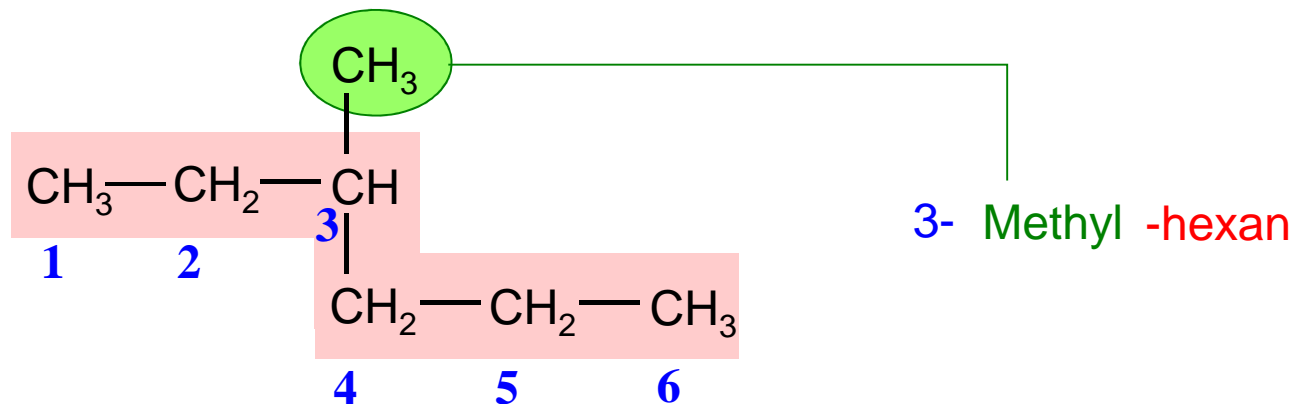
- längste Kette

2. Seitenketten (Alkylgruppen) benennen => „-an“ durch „-yl“ ersetzen

3. Durchnummerieren der Hauptkette

- Seitenkette mit niedrigster Nummer

=> Positionsnummer der Seitenkette voranstellen + Bindestrich



# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 3

## 1. Hauptkette festlegen => hinterer Teil des Namens

- längste Kette
- mit meisten Seitenketten

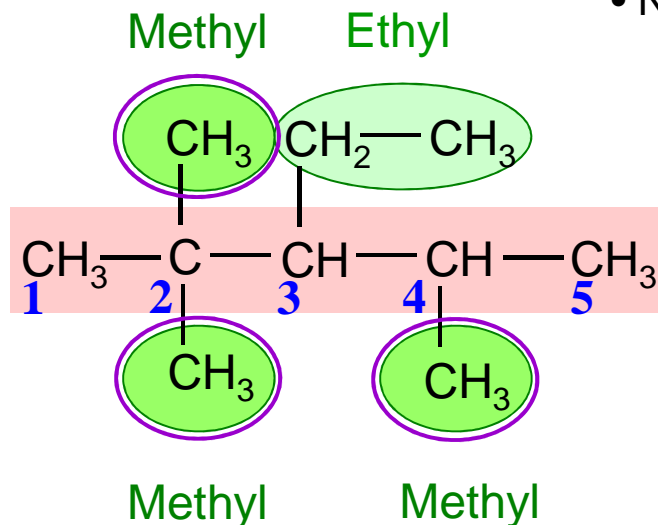
## 2. Seitenketten (Alkylgruppen) benennen => alphabetische Reihenfolge

## 3. Durchnummerieren der Hauptkette

- Seitenkette mit niedrigster Nummer
- insgesamt möglichst niedrige Positionsnummern

## 4. Vollständige Benennung

- Positionsnummern der Seitenkette durch Komma getrennt + Bindestrich
- gleiche Alkylreste zusammenfassen: di, tri, tetra
- Seitenketten alphabetisch sortiert
- Name des Stammalkans



3-Ethyl -2,2,4- tri methyl pentan

# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 4

1. **Hauptkette festlegen** => hinterer Teil des Namens

- längste Kette
- mit meisten Seitenketten

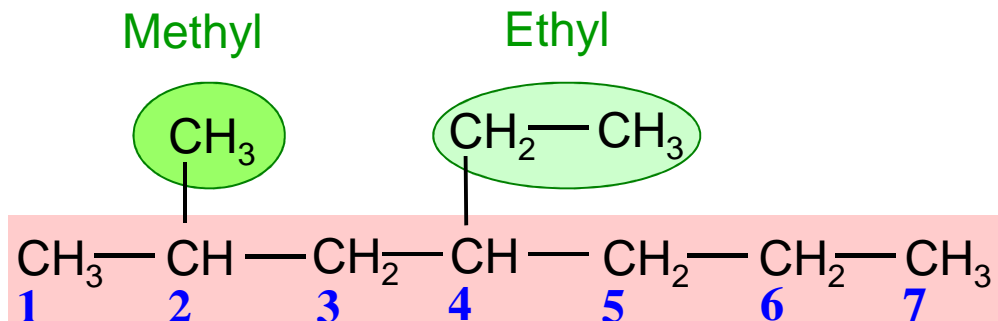
2. **Seitenketten (Alkylgruppen)** benennen => alphabetische Reihenfolge

3. **Durchnummerieren der Hauptkette**

- Seitenkette mit niedrigster Nummer
- insgesamt möglichst niedrige Positionsnummern

4. **Vollständige Benennung**

- Positionsnummern der Seitenkette durch Komma getrennt + Bindestrich
- gleiche Alkylreste zusammenfassen: di, tri, tetra
- Seitenketten alphabetisch sortiert
- Name des Stammalkans



4- Ethyl -2-methyl heptan

# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 5

## 1. Hauptkette festlegen => hinterer Teil des Namens

- längste Kette
- mit meisten Seitenketten

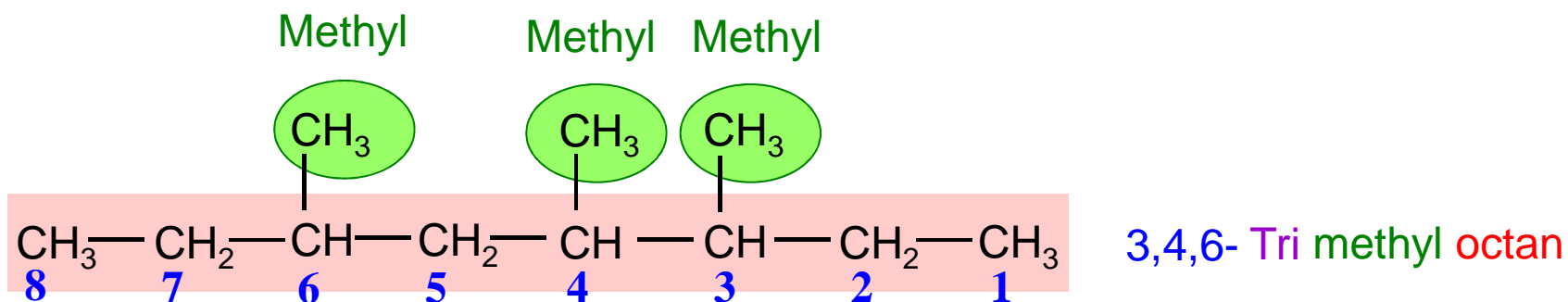
## 2. Seitenketten (Alkylgruppen) benennen => alphabetische Reihenfolge

## 3. Durchnummerieren der Hauptkette

- Seitenkette mit niedrigster Nummer
- insgesamt möglichst niedrige Positionsnummern

## 4. Vollständige Benennung

- Positionsnummern der Seitenkette durch Komma getrennt + Bindestrich
- gleiche Alkylreste zusammenfassen: di, tri, tetra
- Seitenketten alphabetisch sortiert
- Name des Stammalkans





# Benennung verzweigter Alkane – Beispiel 6

## 1. Hauptkette festlegen => hinterer Teil des Namens

- längste Kette
- mit meisten Seitenketten

## 2. Seitenketten (Alkylgruppen) benennen => alphabetische Reihenfolge

## 3. Durchnummerieren der Hauptkette

- Seitenkette mit niedrigster Nummer
- insgesamt möglichst niedrige Positionsnummern
- alphabetische vorrangige Alkylgruppe erhält niedrigere Nummer

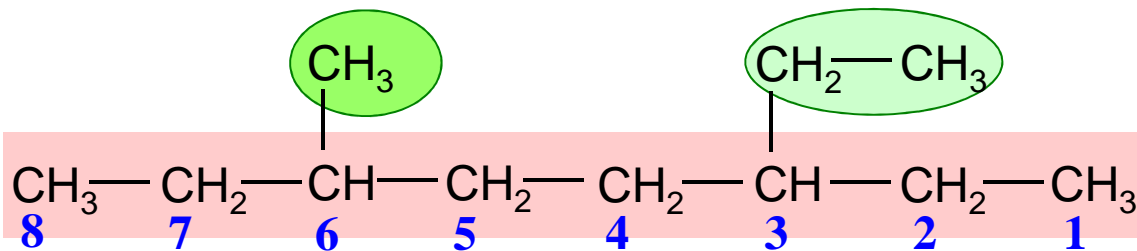
## 4. Vollständige Benennung

- Positionsnummern der Seitenkette durch Komma getrennt + Bindestrich
- gleiche Alkylreste zusammenfassen: di, tri, tetra
- Seitenketten alphabetisch sortiert
- Name des Stammalkans

Ethyl vor  
Methyl

Methyl

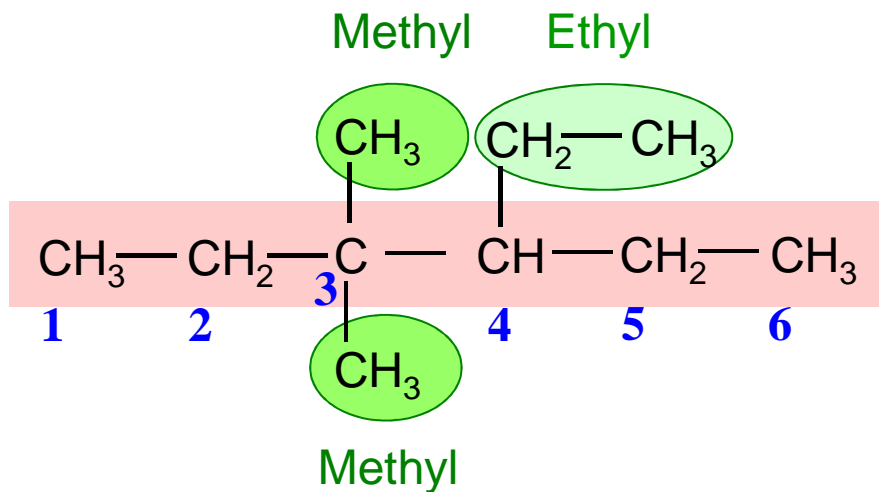
Ethyl



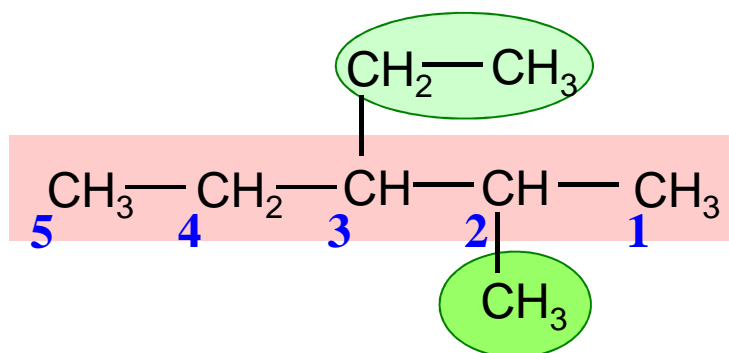
3- Ethyl -6- methyl octan

# Benennung verzweigter Alkane – Beispiele 7\* - 9

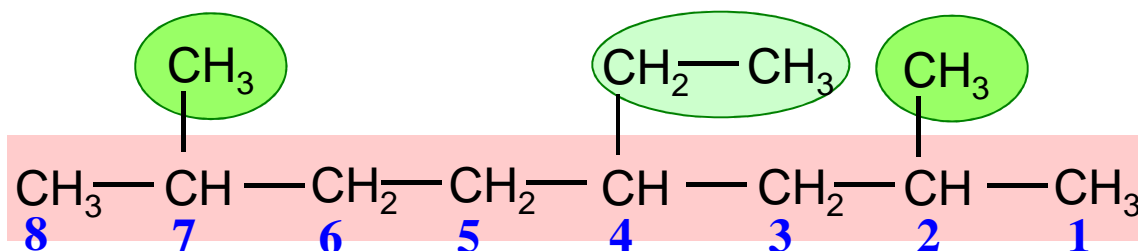
\* Bsp. abweichend vom Buch



4- Ethyl -3,3-dimethylhexan

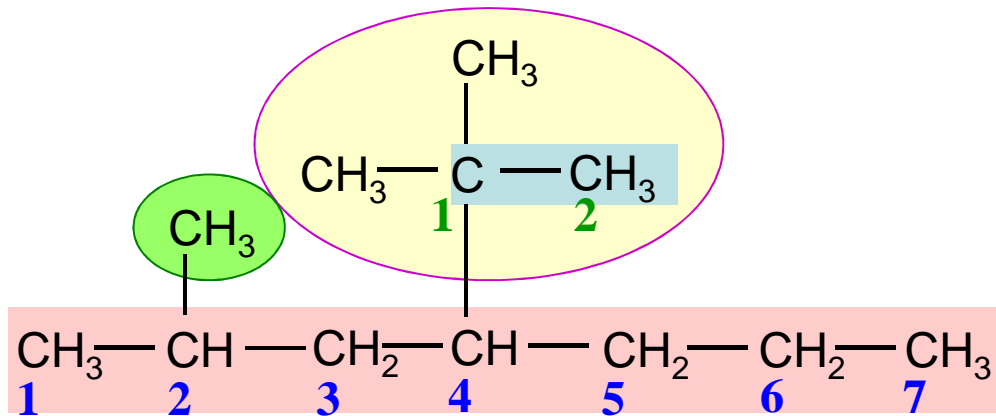


3- Ethyl -2- methylpentan



4- Ethyl -2,7-di methyl octan

# Benennung verzweigter Seitenketten – Beispiel 10



4- (1,1-Dimethylethyl) -2- methyl heptan

Nummerierung der Seitenkette an C-Atom, das an der Hauptkette gebunden ist, beginnen

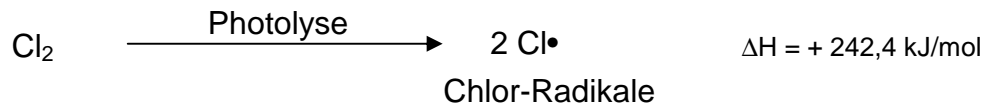
Name der verzweigten Seitenkette in Klammer setzen

Positionsnummer der Verzweigungen mit Bindestrich vor der Klammer angeben

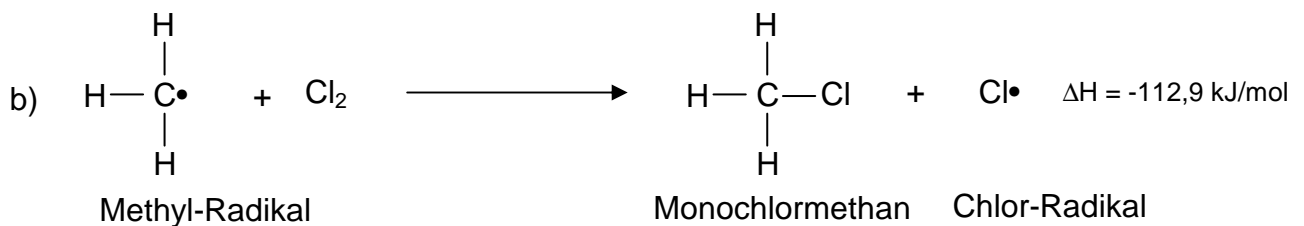
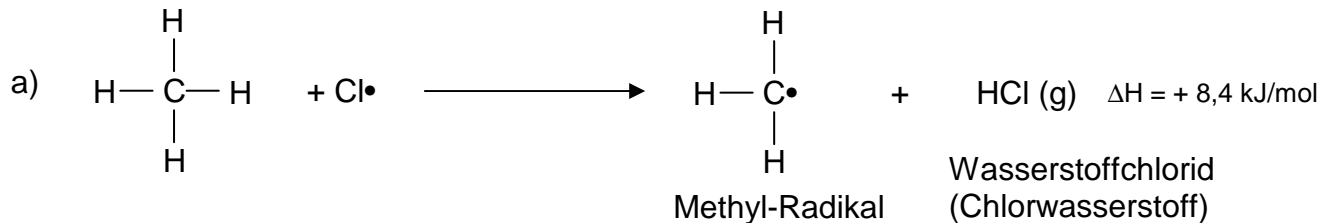
Zahlwort der Seitenkette bestimmt alphabetische Einordnung

# Grundwissen: Mechanismus der radikalischen Substitution $S_R$ bei der Halogenierung von Alkanen

1. Schritt: **Homolyse** von Chlor-Molekülen durch Einwirkung von UV-Licht



2. Schritt: **Kettenfortpflanzungsreaktion**

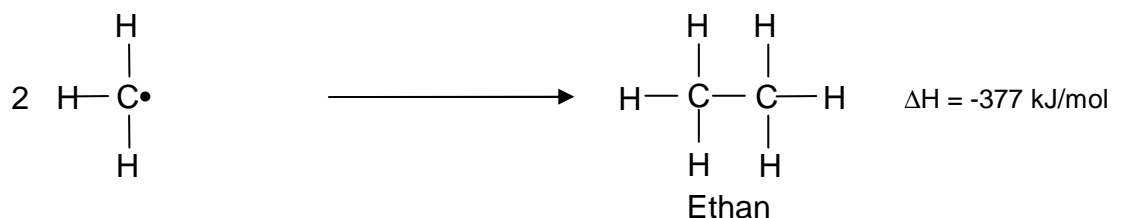
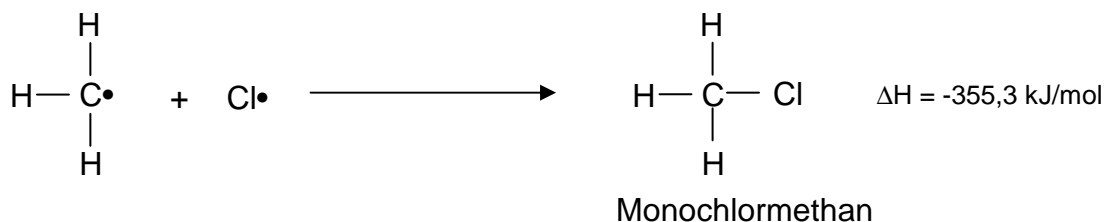


Dann 2a, 2b, 2a, 2b, usw. ...

Weitere Schritte der Kettenreaktion z. B. mit schon halogenierten Produkten führen zur Bildung von Dichlormethan (Methylenchlorid), Trichlormethan (Chloroform), Tetrachlormethan und laufen analog ab.

..... bis schließlich

3. Schritt: **Abbruchreaktionen** (Radikalrekombinationen)



Reaktionstyp: **photochemische Radikalkettensubstitution**

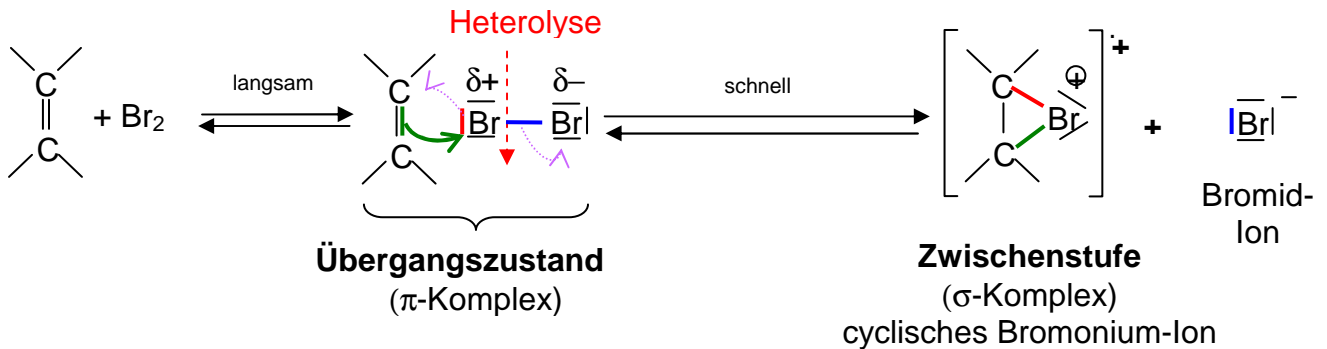
“**Beweise**” für diese Art von Mechanismus ( $S_R$ ):

- es treten niedermolekularen Nebenprodukte (z. B. HCl) auf => Keine Addition sondern Substitution
- es ist Licht notwendig => photochemische Reaktion
- es treten höheren Alkane/Alkanderivate auf => Radikalmechanismus

# Grundwissen: Mechanismus der elektrophilen Addition ( $A_E$ ) bei der Halogenierung von Alkenen

z. B. Reaktion von Brom mit Ethen

## 1. Schritt: elektrophiler Angriff

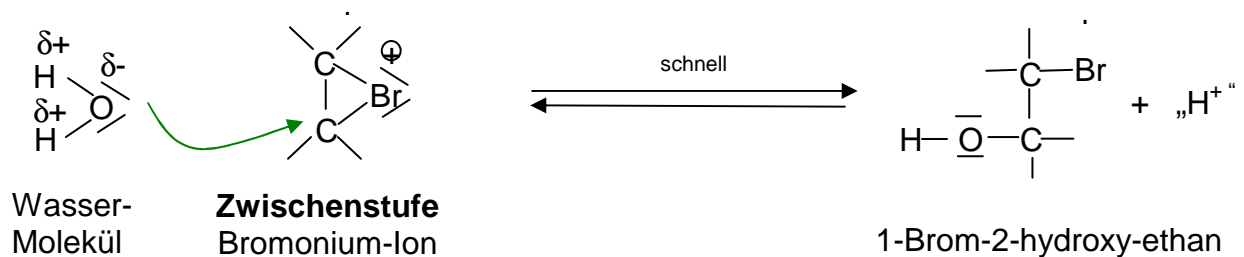


## 2. Schritt: nukleophiler (Rückseiten-)Angriff



Bei Schritt 2 können in einer **Konkurrenzreaktion** auch Wasser-Moleküle (Hydroxid-Ionen) oder **andere Nucleophile** (z. B.  $Cl^-$ -Ionen, die dem Lösemittel zugegeben wurden) den Rückseiten-Angriff durchführen

z. B. Bildung von 1-Brom-2-hydroxy-ethan als Nebenprodukt

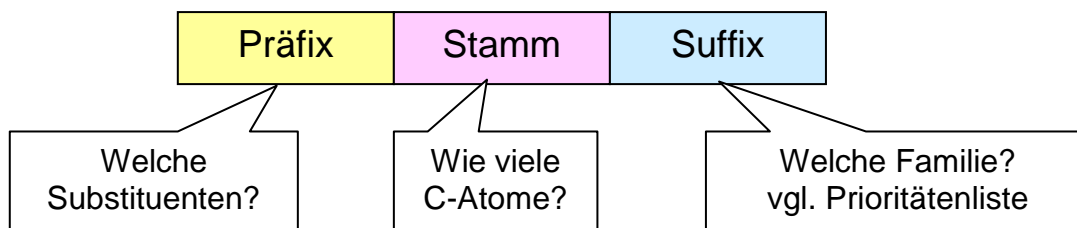


## „Beweise“ für diese Art von Mechanismus

- Reaktion benötigt **kein Licht** (läuft im Dunkeln), keine Wärme => **keine Radikalbildung**
- Reaktion läuft in **polaren Lösemitteln rascher** ab => Hinweis auf **Ionenbildung**, die von polaren Lösemitteln solvatisiert / hydratisiert werden
- In Gegenwart **weiterer Nucleophile** (z.B. Chlorid- / Nitrat-Ionen) entstehen **gemischte Additionsprodukte** (z.B. 2-Brom-1-chlor-ethan) => bestätigt Schritt 2
- **Interhalogenverbindungen** wie z.B. Bromchlorid werden auf Grund der polaren Atombindung **schneller addiert** => Hinweis auf vorausgehende Heterolyse

# IUPAC-Nomenklaturregeln zur Benennung von organischen Molekülen (vereinfachte Version)

1. Der Name des Moleküls wird folgendermaßen aufgebaut:



2. Identifizieren Sie die verschiedenen Substituenten und funktionellen Gruppen, die im Molekül vorhanden sind.
3. Beurteilen Sie die Prioritäten der gefundenen Substituenten und funktionellen Gruppen nach der Prioritätenliste.
4. Suchen Sie die **längste Kohlenwasserstoffkette** mit der **funktionellen Gruppe der höchsten Priorität**.

Die **Anzahl der Kohlenstoffatome** ergibt den **Stammmamen** (leitet sich von den Alkanen ab; bei Ringen: cyclo...; es gilt Ring vor Kette!) und diese **funktionelle Gruppe** wird als **Suffix** angehängt.

Die anderen **Substituenten** werden als **Präfixe** voran gestellt. Mehrere identische Substituenten werden durch die Zahlwörter (di, tri, tetra, ...) angegeben.

Die Suffixe sind:

-al	-CHO	(Aldehyde)
-on	-CO-	(Ketone)
-ol	-OH	(Alkohole)
-en	-CH=CH-	(Alkene)
-in	-C≡C-	(Alkine)
-an		Alkane, Cycloalkane (ohne Mehrfachbindungen)
	usw.	

Unterschiedliche Funktionalitäten werden im Namen entsprechen dieser Reihenfolge gelistet: **an - en - in - ol - on - al**

- **on, ol** und **al** werden immer mit **an** oder **en** oder **in** verbunden
  - **an** wird nicht geschrieben, wenn **en** oder **in** benutzt wird.
  - **ol** wird nicht gemeinsam mit **al** oder **on** verwendet. Stattdessen wird die OH-Gruppe als Hydroxy-Substituent aufgeführt.
5. Nummerieren Sie diese längste Kette nun so, dass die funktionelle Gruppe der höchsten Priorität die **niedrigste Positionsziffer** erhält. Die Positionsziffern werden vor den Stamm geschrieben, die Positionsziffer 1 gibt man in der Regel nicht an.  
Ist die funktionelle Gruppe in der Mitte oder gibt es keine höchstprioritäre funktionelle Gruppe (z.B. bei Polyhalogenalkanen), dann nummerieren Sie so, dass die **Summe der Positionsziffern aller anderen Substituenten möglichst klein** ist.
  6. Beachten Sie bei der Benennung mehrerer funktioneller Gruppen die **Reihenfolge der Priorität**. Nur die **höchste Priorität steht am Ende** und ist der **Namensgeber** der Substanzklasse. Unmittelbar davor steht der **Stammmamen** (zugrundeliegender Kohlenwasserstoff). Alle **weiteren Substituenten** werden mit Angabe der Positionsziffer als **Präfixe in alphabetischer Reihenfolge vorangefügt**. Zahlwörter (z.B. di-, tri- oder tetra-) werden hierbei für die Sortierreihenfolge nicht berücksichtigt.
  7. Ist der Substituent selbst substituiert, wird für ihn ein Name analog Regel 1-6 gebildet, der auf **yl** endet (nicht auf an). Allerdings beginnt die **Nummerierung im Substituenten mit dem Atom, das an den Stamm gebunden ist**. Substituierte Substituenten werden als Ganzes eingeklammert, wenn sie selber eine Positionsnummer relativ zum Stamm haben, z.B. 5-(2-Methylpropyl)-nonan.
  8. Die Konfiguration von **Doppelbindungen** wird nach dem **E/Z-Formalismus** bestimmt. Die Inspektion der Substituenten auf jeder Doppelbindungshälfte nach **CIP** (Cahn-Ingold-Prelog) ergibt die **Prioritäten** (**Achtung: Priorität abweichend nach Ordnungszahlen!**). Die Konfiguration der Substituenten höherer Priorität erlaubt die **E/Z-Bezeichnung**. Die **Lage** (wenn nötig) und **Doppelbindungskonfiguration** werden **vor dem systematischen Namen in Klammern** gesetzt.
  9. **Bindestrache** werden nur zwischen Zahlen und Text eingefügt, sowie zwischen einer geschlossenen Klammer und weiterem Text.

Quelle: <http://www-organik.chemie.uni-wuerzburg.de/praktika/uebung-bio1/nomenklatur-regeln-ws08.pdf>

## Benennung und Priorität ausgewählter (funktioneller) Gruppen

Bei der Benennung von Molekülen mit mehreren funktionellen Gruppen wird die funktionelle Gruppe mit der höchsten Priorität als Suffix (Nachsilbe) verwendet, die übrigen funktionellen Gruppen werden als Präfixe mit Angabe der Positionsnummer vorangestellt. Die funktionelle Gruppe mit der höchsten Priorität erhält eine möglichst niedrige Positionsnummer.

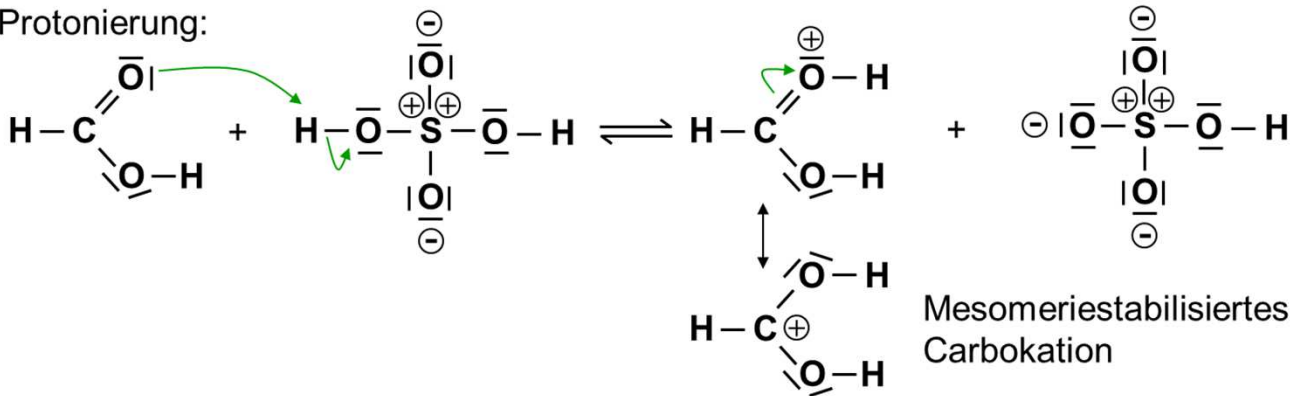
**Achtung, Abweichung bei E-Z-Benennung! Die Priorität an der Doppelbindung richtet sich nach der Ordnungszahl der Atome. I > Br > Cl > S > F > O > N > C > H**

Verbindungsklasse	charakteristische Gruppe	Vorsilbe (Präfix)	Nachsilbe (Suffix)
Carbonsäuren	Carboxygruppe $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \mid \\ \text{O}-\text{H} \end{array}$	Carboxy-	<b>-säure</b> (-carbonsäure, dann ist ein C-Atom weniger im Stammnamen zu berücksichtigen)
Carbonsäureester	Carboxylatgruppe $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \mid \\ \text{O}-\text{C}- \\ \mid \end{array}$	(Alkyl-)oxycarbonyl-	<b>-oat</b> -carboxylat <i>alternativ: -ester</i>
Aldehyde	Carbonylgruppe $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{C} \\ \mid \\ \text{H} \end{array}$	Oxo- / Formyl -CHO als Seitenkette	<b>-al</b>
Ketone		Oxo-	<b>-on</b>
Alkohole	Hydroxygruppe $-\text{O}-\text{H}$	Hydroxy-	<b>-ol</b>
Amine	Aminogruppe $\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \\ -\text{N} \\ \diagdown \\ \text{H} \end{array}$	Amino-	-amin
Ether	Alkoxygruppe $\begin{array}{c} \mid \\ -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \\ \mid \end{array}$	Alkyloxy-	<b>-ether</b>
Alkene	Doppelbindung $\begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \text{C} = \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array}$	--	<b>-en</b>
Alkine	Dreifachbindung $-\text{C} \equiv \text{C}-$	--	<b>-in</b>
Halogenide	$-\text{X}$ X = F, Cl, Br, I	<b>Brom- Chlor- Fluor- Iod-</b>	-- Alphabetisch wie Alkyl-Seitenketten
Alkane	Einfachbindung $\begin{array}{c} \mid \\ -\text{C}- \\ \mid \end{array}$	Alkyl-	<b>-an</b>

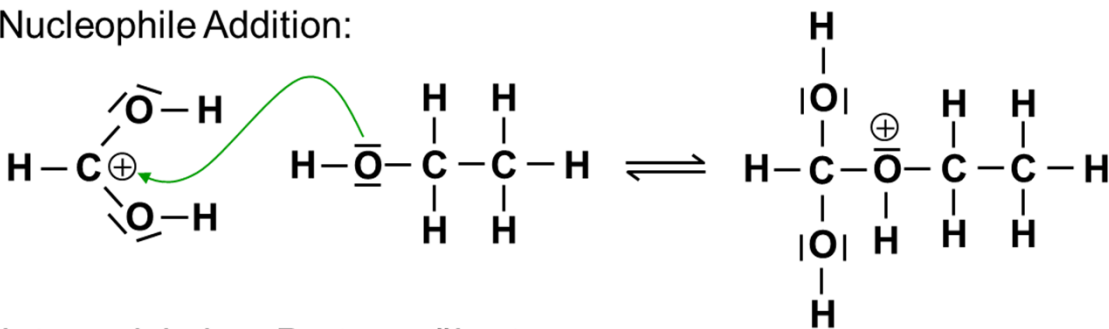
Abnehmende Priorität der funktionellen Gruppe

# GW: Mechanismus der säurekatalysierte Ester-Kondensation

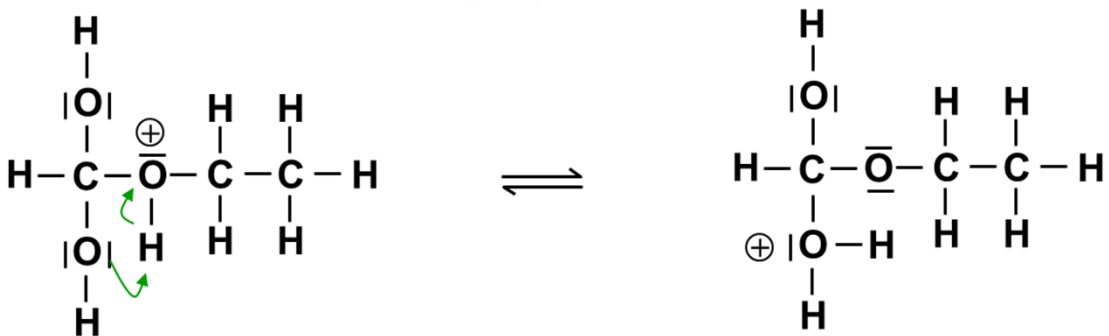
Protonierung:



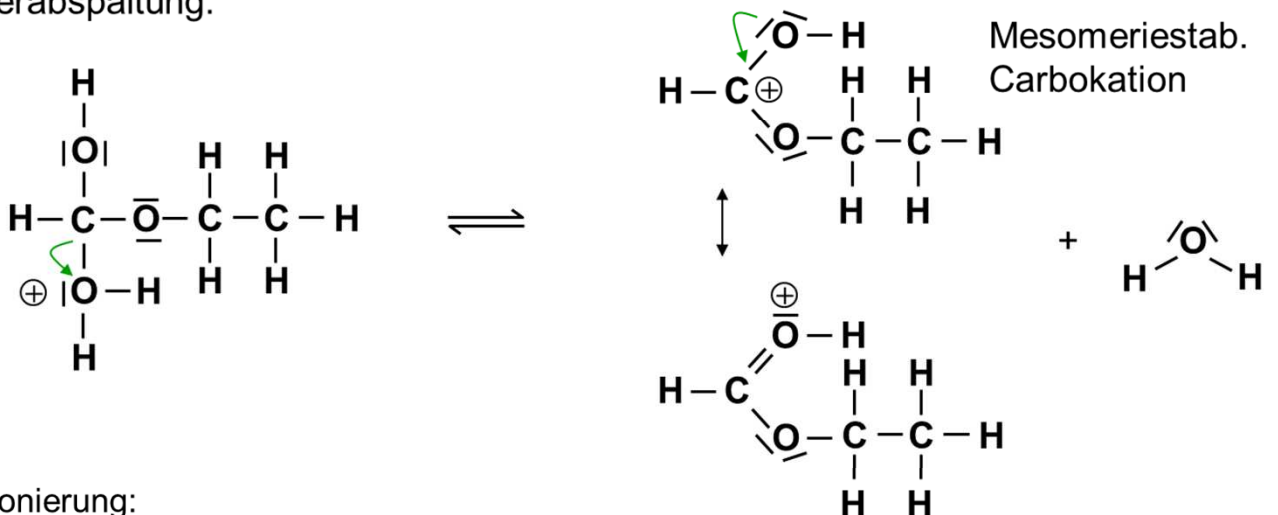
Nucleophile Addition:



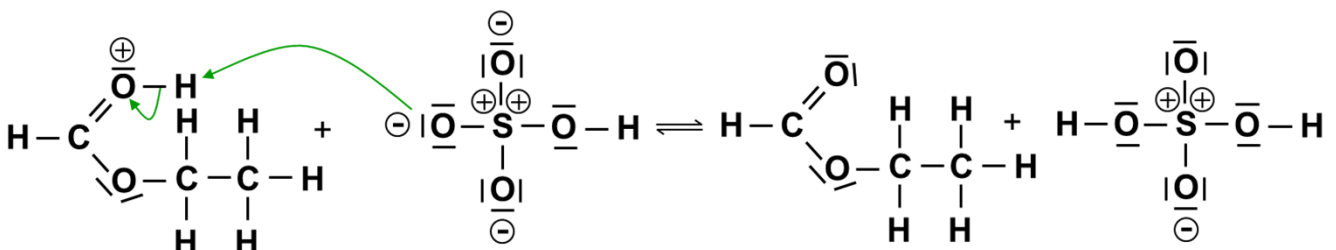
Intramolekulare Protonenübertragung:



Wasserabspaltung:



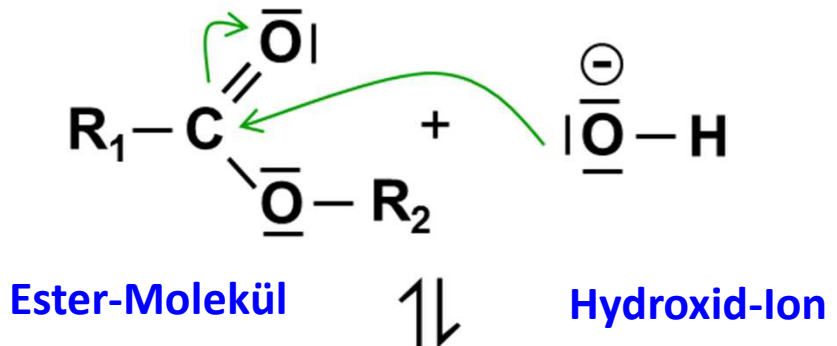
Deprotonierung:



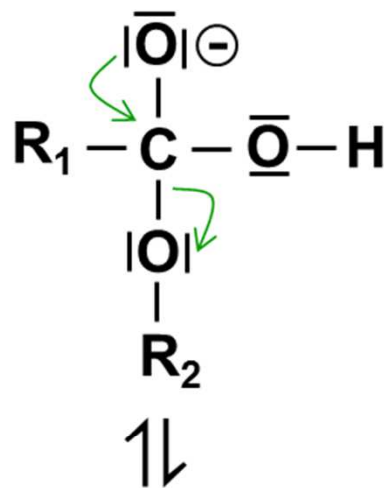


# GW: Mechanismus der basischen Esterhydrolyse (Verseifung)

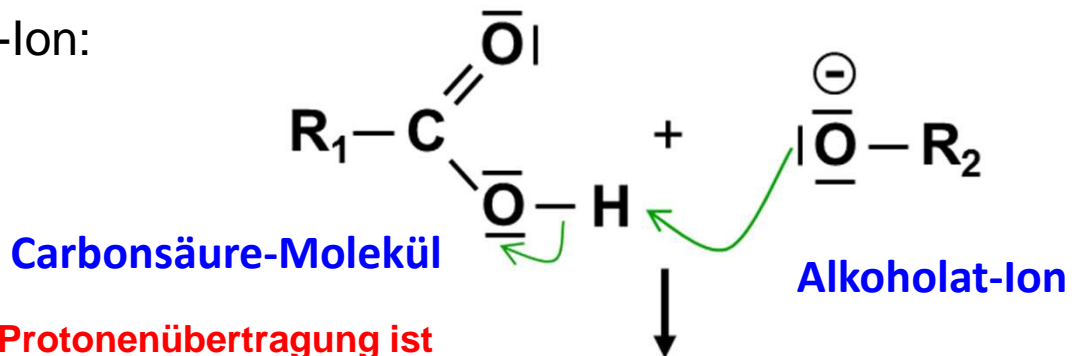
Nucleophiler Angriff des Hydroxid-Ions:



Abspaltung des Alkoholat-Ions:



Protonenübertragung  
zwischen Carbonsäure und  
Alkoholat-Ion:



**Achtung!!! Protonenübertragung ist keine Gleichgewichtsreaktion, da Carbonsäure-Molekül stärkere Säure als Alkohol-Molekül ist und deshalb das Alkoholat-Ion protoniert.**

