

Grundregeln der Nomenklatur einfacher Alkane nach IUPAC

1. Die Kohlenwasserstoffe (KW) mit der C-Atomzahl 1 bis 4 erhalten sogenannte “**Trivialnamen**”. Ab C₅H₁₂ (**Pentan**) werden griech.-lateinische Zahlwörter mit der **Endung -an** verwendet. Geradkettige (unverzweigte KW) heißen **n(ormal)-Alkane**, also n-Pentan, n-Hexan usw.

C₁H₄: Methan
C₂H₆: Ethan
C₃H₈: Propan
C₄H₁₀: Butan

2. Bei den nichtgeradkettigen oder **verzweigten Alkanen** bestimmt die längste Kette, die sog. **Hauptkette**, den Stammnamen, also -pentan, -hexan usw. Wenn es in einem Molekül zwei gleich lange “längste” Ketten gibt, dann ist die Kette mit den **meisten Seitenketten (Substituenten)** die Hauptkette.

Beispiel:
$$\begin{array}{ccccccc} & & & 3 & 4 & 5 & \\ & & & | & | & | & \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 & & & & & & \\ & | & | & & & & \\ & \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_3 & & & & & \end{array}$$
 richtig: 3-Ethyl-2-methyl-pentan
falsch: 3-Iso-propyl-pentan

3. Die C-Atome der Hauptkette werden so durchnummeriert, daß die Substituenten tragenden Atome möglichst **niedrige Ziffern** erhalten.

Beispiel:
$$\begin{array}{ccccccc} & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & \\ & | & | & | & | & | & \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3 & & & & & & \\ & | & | & | & & & \\ & \text{CH}_3 & \text{CH}_3 & \text{CH}_3 & & & \end{array}$$
 richtig: 2,3,5-Trimethyl-hexan
falsch: 2,4,5-Trimethyl-hexan

4. Die **einwertigen Alkan-Reste** tragen die **Endung -yl** (allgemein: -alkyl).
Also: CH₃- : Methyl-Rest, C₂H₅- : Ethyl-Rest, usw.

5. Die **verzweigten Reste** werden entsprechend ihrer Herkunft aus Alkanen oder Alkoholen folgendermaßen benannt:

CH₃-CH-CH₃ : *Isobutan* (2-Methylpropan) \rightleftharpoons **CH₃-CH-CH₂- :** *Isobutyl-Rest*

CH₃-CH-CH₂-CH₃ : *Isopentan* \rightleftharpoons **CH₃-CH-CH₂-CH₂- :** *Isopentyl-Rest*

Ein iso-Rest hat eine y-Form!

Die iso-Reste sind kursiv und fett geschrieben.

CH₃-CH₂-CH- : **sek.**-(undärer) Butyl-Rest \rightleftharpoons **(CH₃)₃C-** : **tert.**-(iärer) Butyl-Rest

6. Der Name der Seitenkette wird dem Namen der Hauptkette vorangestellt, dabei wird dem Namen des seitenständigen Alkylrestes die **Ziffer der Verzweigungsstelle** von der Hauptkette vorangestellt; z.B.: 2-Methylpropan.

7. Tritt die **gleiche Alkylgruppe mehrfach** als Seitenkette auf, wird durch die **Vorsilbe** (“Präfix”) “di-” (2), “tri-” (3), “tetra-” (4) usw. angegeben, wie oft die betreffende Alkylgruppe insgesamt im Molekül vorhanden ist. Dabei wird aus Gründen der Eindeutigkeit die **Ziffer des betreffenden C-Atoms, an dem die Seitengruppe sitzt, ebenso oft angegeben** wie die Seitengruppe vorhanden ist. Sind also an mehreren C-Atomen der Hauptkette z.B. drei Methylgruppen vorhanden, heißt es nicht 2-Methyl-3-Methyl-5-Methyl-..., sondern 2,3,5-Trimethyl... .

8. Sind **mehrere unterschiedliche Alkylgruppen** vorhanden, so werden sie im Namen der Verbindung in alphabetischer Reihenfolge angeführt. Dabei werden die Vorsilben **nicht** in die alphabetische Reihenfolge miteinbezogen! Beispiel: 3,3-Diethyl-4-methyl-5-isopropyl-octan (IUPAC 2004).

9. Die Benennung kann mit der Software **ACD/ChemSketch** überprüft werden:
<http://www.acdlabs.com/home/>