

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Vierte Auflage

Drittes und Viertes Ergänzungswerk

Die Literatur von 1930 bis 1959 umfassend

Herausgegeben vom
Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie
Frankfurt am Main

Bearbeitet von

Reiner Luckenbach

Unter Mitwirkung von

Oskar Weissbach

Erich Bayer · Adolf Fahrmeir · Friedo Giese · Volker Guth · Irmgard Hagel
Franz-Josef Heinen · Günter Imsiecke · Ursula Jacobshagen · Rotraud Kayser
Klaus Koulen · Bruno Langhammer · Dieter Liebegott · Lothar Mähler
Annerose Naumann · Wilma Nickel · Burkhard Polenski · Peter Raig
Helmut Rockelmann · Jürgen Schunck · Eberhard Schwarz · Ilse Sölken
Josef Sunkel · Achim Trede · Paul Vincke

Zweiundzwanzigster Band

Sechster Teil

Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Vierte Auflage

Drittes und Viertes Ergänzungswerk

Die Literatur von 1930 bis 1959 umfassend

Herausgegeben vom
Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie
Frankfurt am Main

Bearbeitet von
Reiner Luckenbach

Unter Mitwirkung von

Oskar Weissbach

Erich Bayer · Adolf Fahrmeir · Friedo Giese · Volker Guth · Irmgard Hagel
Franz-Josef Heinen · Günter Imsieke · Ursula Jacobshagen · Rotraud Kayser
Klaus Koulen · Bruno Langhammer · Dieter Liebegott · Lothar Mähler
Annerose Naumann · Wilma Nickel · Burkhard Polenski · Peter Raig
Helmut Rockelmann · Jürgen Schunck · Eberhard Schwarz · Ilse Sölken
Josef Sunkel · Achim Trede · Paul Vincke

Zweiundzwanzigster Band

Sechster Teil



Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York 1979

Beilstein-Handbuch der Organischen Chemie

ISBN 3-540-09776-7 Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York
ISBN 0-387-09776-7 Springer-Verlag, New York · Heidelberg · Berlin

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. im Beilstein-Handbuch berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten.

© by Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg 1979
Library of Congress Catalog Card Number: 22-79
Printed in Germany

Satz, Druck und Bindearbeiten: Universitätsdruckerei H. Stürtz AG Würzburg

Abkürzungen und Symbole¹⁾

A.	Äthanol
Acn.	Aceton
Ae.	Diäthyläther
äthanol.	äthanolisch
alkal.	alkalisch
Anm.	Anmerkung
at	technische Atmosphäre ($98\,066,5\text{ N}\cdot\text{m}^{-2} = 0,980665$ bar = 735,559 Torr)
atm	physikalische Atmosphäre
Aufl.	Auflage
B.	Bildungsweise(n), Bildung
Bd.	Band
Bzl.	Benzol
bzw.	beziehungsweise
c	Konzentration einer optisch aktiven Verbindung in g/100 ml Lösung
D	1) Debye (Dimension des Dipol- moments) 2) Dichte (z.B. D_4^{20} : Dichte bei 20° bezogen auf Wasser von 4°)
d	Tag
$D(R-X)$	Dissoziationsenergie der Ver- bindung RX in die freien Radi- kale R [*] und X [*]
Diss.	Dissertation
DMF	Dimethylformamid
DMSO	Dimethylsulfoxid
E	1) Erstarrungspunkt 2) Ergänzungswerk des Beilstein-Handbuchs
E.	Äthylacetat
Engl.	Essigsäure (Eisessig)
engl. Ausg.	englische Ausgabe
EPR	Elektronen-paramagnetische Resonanz (= ESR)
F	Schmelzpunkt (-bereich)
Gew.-%	Gewichtsprozent
grad	Grad
H	Hauptwerk des Beilstein- Handbuchs
h	Stunde
Hz	Hertz (= s ⁻¹)
K	Grad Kelvin
konz.	konzentriert
korrr.	korrigiert

Abbreviations and symbols²⁾

ethanol
acetone
diethyl ether
solution in ethanol
alkaline
footnote
technical atmosphere
physical (standard) atmosphere
edition
formation
volume
benzene
or, respectively
concentration of an optically active compound in g/100 ml solution
1) Debye (dimension of dipole moment)
2) density (e.g. D_4^{20} : density at 20° related to water at 4°)
day
dissociation energy of the compound RX to form the free radicals R [*] and X [*]
dissertation, thesis
dimethylformamide
dimethyl sulfoxide
1) freezing (solidification) point
2) Beilstein supplementary series
ethyl acetate
acetic acid
english edition
electron paramagnetic resonance (= ESR)
melting point (range)
percent by weight
degree
Beilstein basic series
hour
cycles per second (= s ⁻¹)
degree Kelvin
concentrated
corrected

¹⁾ Bezüglich weiterer, hier nicht aufgeführter Symbole und Abkürzungen für physikalisch-chemische Größen und Einheiten s.

²⁾ For other symbols and abbreviations for physicochemical quantities and units not listed here see

Kp	Siedepunkt (-bereich)	boiling point (range)
l	1) Liter	1) litre
	2) Rohrlänge in dm	2) length of cell in dm
$[M]_{\lambda}^t$	molares optisches Drehungsvermögen für Licht der Wellenlänge λ bei der Temperatur t	molar rotation for the wavelength λ and the temperature t
m	1) Meter	1) metre
	2) Molarität einer Lösung	2) molarity of solution
Me.	Methanol	methanol
n	1) bei Dimensionen von Elementarzellen: Anzahl der Moleküle pro Elementarzelle	1) number of formula units in the unit cell
	2) Normalität einer Lösung	2) normality of solution
	3) nano (= 10^{-9})	3) nano (= 10^{-9})
	4) Brechungsindex (z. B. $n_{656,1}^{15}$: Brechungsindex für Licht der Wellenlänge 656,1 nm bei 15°)	4) refractive index (e.g. $n_{656,1}^{15}$: refractive index for the wavelength 656.1 nm and 15°)
opt.-inakt.	optisch inaktiv	optically inactive
p	Konzentration einer optisch aktiven Verbindung in g/100 g Lösung	concentration of an optically active compound in g/100 g solution
PAe.	Petroläther, Benzin, Ligroin	petroleum ether, ligroin
Py.	Pyridin	pyridine
S.	Seite	page
s	Sekunde	second
s.	siehe	see
s. a.	siehe auch	see also
s. o.	siehe oben	see above
sog.	sogenannt	so called
Spl.	Supplement	supplement
... stdg.	... stündig (z. B. 3-stündig)	for ... hours (e.g. for 3 hours)
s. u.	siehe unten	see below
Syst.-Nr.	System-Nummer	system number
THF	Tetrahydrofuran	tetrahydrofuran
Tl.	Teil	part
Torr	Torr (= mm Quecksilber)	torr (= millimetre of mercury)
unkorr.	unkorrigiert	uncorrected
unverd.	unverdünnt	undiluted
verd.	verdünnt	diluted
vgl.	vergleiche	compare (cf.)
W.	Wasser	water
wss.	wässrig	aqueous
z. B.	zum Beispiel	for example (e.g.)
Zers.	Zersetzung	decomposition
zit. bei	zitiert bei	cited in
α_{λ}^t	optisches Drehungsvermögen (Erläuterung s. bei $[M]_{\lambda}^t$)	angle of rotation (for explanation see $[M]_{\lambda}^t$)
$[\alpha]_{\lambda}^t$	spezifisches optisches Drehungsvermögen (Erläuterung s. bei $[M]_{\lambda}^t$)	specific rotation (for explanation see $[M]_{\lambda}^t$)
ϵ	1) Dielektrizitätskonstante	1) dielectric constant, relative permittivity
	2) Molarer dekadischer Extinktionskoeffizient	2) molar extinction coefficient
$\lambda_{(\max)}$	Wellenlänge (eines Absorptionsmaximums)	wavelength (of an absorption maximum)
μ	Mikron (= 10^{-6} m)	micron (= 10^{-6} m)
$^{\circ}$	Grad Celsius oder Grad (Drehungswinkel)	degree Celsius or degree (angle of rotation)

Stereochemische Bezeichnungen

Übersicht

Präfix	Definition in §	Symbol	Definition in §
<i>allo</i>	5c, 6c	<i>c</i>	4a–e
<i>altro</i>	5c, 6c	<i>c_F</i>	7a
<i>anti</i>	3a, 9	<i>D</i>	6a, b, c
<i>arabino</i>	5c	<i>D_g</i>	6b
<i>cat_F</i>	7a	<i>D_r</i>	7b
<i>cis</i>	2	<i>D_s</i>	6b
<i>endo</i>	8	(<i>e</i>)	3b
<i>ent</i>	10e	(<i>E</i>)	3a
<i>erythro</i>	5a	<i>L</i>	6a, b, c
<i>exo</i>	8	<i>L_g</i>	6b
<i>galacto</i>	5c, 6c	<i>L_r</i>	7b
<i>gluco</i>	5c, 6c	<i>L_s</i>	6b
<i>glycero</i>	6c	<i>r</i>	4c, d, e
<i>gulo</i>	5c, 6c	<i>r_F</i>	7a
<i>ido</i>	5c, 6c	(<i>r</i>)	1a
<i>lyxo</i>	5c	(<i>R</i>)	1a
<i>manno</i>	5c, 6c	(<i>R_a</i>)	1b
<i>meso</i>	5b	(<i>R_p</i>)	1b
<i>rac</i>	10e	(<i>RS</i>)	1a
<i>racem.</i>	5b	(<i>s</i>)	1a
<i>rel</i>	1c	(<i>S</i>)	1a
<i>ribo</i>	5c	(<i>S_a</i>)	1b
<i>s-cis</i>	3b	(<i>S_p</i>)	1b
<i>seqcis</i>	3a	<i>t</i>	4a–e
<i>seqtrans</i>	3a	<i>t_F</i>	7a
<i>s-trans</i>	3b	(<i>z</i>)	3b
<i>syn</i>	3a, 9	(<i>Z</i>)	3a
<i>talo</i>	5c, 6c	α	10a, c, d
<i>threo</i>	5a	αF	10b, c
<i>trans</i>	2	β	10a, c, d
<i>xylo</i>	5c	βF	10b, c
		ξ	11a
		(ξ)	11c
		Ξ	11b
		(Ξ)	11b
		(Ξa)	11c
		(Ξp)	11c
		*	12

§ 1. a) Die Symbole (*R*) und (*S*) bzw. (*r*) und (*s*) kennzeichnen die absolute Konfiguration an Chiralitätszentren (Asymmetriezentren) bzw. „Pseudoasymmetriezentren“ gemäss der „Sequenzregel“ und ihren Anwendungsvorschriften (*Cahn, Ingold, Prelog*, *Experientia* 12 [1956] 81; *Ang. Ch.* 78 [1966] 413, 419; *Ang. Ch. int. Ed.* 5 [1966] 385, 390, 511; *Cahn, Ingold, Soc.* 1951 612; s. a. *Cahn, J. chem. Educ.* 41 [1964] 116, 508).

Zur Kennzeichnung der Konfiguration von Racematen aus Verbindungen mit mehreren Chiralitätszentren dienen die Buchstabenpaare (*RS*) und (*SR*), wobei z. B. durch das Symbol (1*RS*,2*SR*) das aus dem (1*R*,2*S*)-Enantiomeren und dem (1*S*,2*R*)-Enantiomeren bestehende Racemat spezifiziert wird (vgl. *Cahn, Ingold, Prelog*, *Ang. Ch.* 78 435; *Ang. Ch. int. Ed.* 5 404).

Das Symbol (*RS*) kennzeichnet ein Gemisch von annähernd gleichen Teilen des (*R*)-Enantiomeren und des (*S*)-Enantiomeren.

Beispiele:

(*R*)-Propan-1,2-diol [E IV 1 2468]

(1*R*,3*S*,4*S*)-3-Chlor-*p*-menthan [E IV 5 152]

(3*aR*:4*S*:8*R*:8*aS*:9*s*)-9-Hydroxy-2.2.4.8-tetramethyl-decahydro-4.8-methano-azulen [E III 6 425]

(1*RS*,2*SR*)-2-Amino-1-benzo[1,3]dioxol-5-yl-propan-1-ol [E III/IV 19 4221]

(2*RS*,4'*R*,8'*R*)- β -Tocopherol [E III/IV 17 1427]

b) Die Symbole (*R_a*) und (*S_a*) bzw. (*R_p*) und (*S_p*) werden in Anlehnung an den Vorschlag von *Cahn, Ingold* und *Prelog* (*Ang. Ch.* 78 437; *Ang. Ch. int. Ed.* 5 406) zur Kennzeichnung der Konfiguration von Elementen der axialen bzw. planaren Chiralität verwendet.

Beispiele:

(*R_a*)-1,11-Dimethyl-5,7-dihydro-dibenz[*c,e*]oxepin [E III/IV 17 642]

(*R_a*:*S_a*)-3.3'.6'.3''-Tetrabrom-2'.5'-bis-[(1*R*)-menthyloxy]-acetoxy]-2.4.6.2''.4''.6''-hexamethyl-*p*-terphenyl [E III 6 5820]

(*R_p*)-Cyclohexanhexol-(1*r*.2*c*.3*t*.4*c*.5*t*.6*t*) [E III 6 6925]

c) Das Symbol *rel* in einem mindestens zwei Chiralitätssymbole [(*R*) bzw. (*S*); s. o.] enthaltenden Namen einer optisch-aktiven Verbindung deutet an, dass die Chiralitätssymbole keine absolute, sondern nur eine relative Konfiguration spezifizieren.

Beispiel:

(+)(*rel*-1*R*:1'*S*)-(1*rH*.1'*r'H*)-Bicyclohexyl-dicarbonsäure-(2*c*.2'*t*) [E III 9 4021]

§ 2. Die Präfixe *cis* bzw. *trans* geben an, dass sich die beiden Bezugsliganden auf der gleichen Seite (*cis*) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (*trans*) der Bezugsfläche befinden. Bei Olefinen verläuft die „Bezugsfläche“ durch die beiden doppelt gebundenen Atome und steht senkrecht zu der Ebene, in der die doppelt gebundenen und die vier hiermit einfach verbundenen Atome liegen; bei cyclischen Verbindungen wird die Bezugsfläche durch die Ringatome fixiert.

Beispiele:

β -Brom-*cis*-zimtsäure [E III 9 2732]

2-[4-Nitro-*trans*-styryl]-pyridin [E III/IV 20 3879]

5-*cis*-Propenyl-benzo[1,3]dioxol [E III/IV 19 273]

- 3-[*trans*-2-Nitro-vinyl]-pyridin [E III/IV 20 2887]
trans-2-Methyl-cyclohexanol [E IV 6 100]
cis-2-Isopropyl-bicyclohexyl [E IV 5 352]
 4a,8a-Dibrom-*trans*-decahydro-naphthalin [E IV 5 314]

§ 3. a) Die — bei Bedarf mit einer Stellungsbezeichnung versehenen — Symbole (*E*) bzw. (*Z*) am Anfang eines Namens oder Namensteils kennzeichnen die Konfiguration an vorhandenen Doppelbindungen. Sie zeigen an, dass sich die — jeweils mit Hilfe der Sequenzregel (s. § 1a) ausgewählten — Bezugsliganden an den jeweiligen doppelt gebundenen Atomen auf den entgegengesetzten Seiten (*E*) bzw. auf der gleichen Seite (*Z*) der Bezugsfläche (vgl. § 2) befinden.

Beispiele:

- (*E*)-1,2,3-Trichlor-propen [E IV 1 748]
 (*Z*)-1,3-Dichlor-but-2-en [E IV 1 786]
endo-[(*Z*)-2-Cyclohexyl-2-phenyl-vinyl]-tropan [E III/IV 20 3711]
 Piperonal-(*E*)-oxim [E III/IV 19 1667]

Anstelle von (*E*) bzw. (*Z*) waren früher die Bezeichnungen *seqtrans* bzw. *seqcis* sowie zur Kennzeichnung von stickstoffhaltigen funktionellen Derivaten der Aldehyde auch die Bezeichnungen *syn* bzw. *anti* in Gebrauch.

Beispiele:

- (3*S*)-9.10-Seco-cholestadien-(5(10).7*seqtrans*)-ol-(3) [E III 6 2602]
 1.1.3-Trimethyl-cyclohexen-(3)-on-(5)-*seqcis*-oxim [E III 7 285]
 Perillaaldehyd-*anti*-oxim [E III 7 567]

b) Die — bei Bedarf mit einer Stellungsbezeichnung versehenen — Symbole (*e*) bzw. (*z*) am Anfang eines Namens oder Namensteils kennzeichnen die Konfiguration (Konformation) an den vorhandenen nicht frei drehbaren Einfachbindungen zwischen zwei dreibindigen Atomen. Sie zeigen an, dass sich die — jeweils mit Hilfe der Sequenzregel (s. § 1a) ausgewählten — Bezugsliganden an den beiden einfach gebundenen Atomen auf den entgegengesetzten Seiten (*e*) bzw. auf der gleichen Seite (*z*) der durch die einfach gebundenen Atome verlaufenden Bezugsgeraden befinden.

Beispiel:

- (*e*)-*N*-Methyl-thioformamid [E IV 4 171]

Mit gleicher Bedeutung werden in der Literatur auch die Bezeichnungen *s-trans* (= *single-trans*) bzw. *s-cis* (= *single-cis*) verwendet.

§ 4. a) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsnummer einer C,C-Doppelbindung geben an, dass die jeweiligen Bezugsliganden an den beiden doppelt-gebundenen Kohlenstoff-Atomen *cis*-ständig (*c*) bzw. *trans*-ständig (*t*) sind (vgl. § 2). Als „Bezugsligand“ gilt an jedem der beiden doppelt-gebundenen Atome derjenige äussere — d. h. nicht der Bezugsfläche angehörende — Ligand, der der gleichen Bezifferungseinheit angehört wie das mit ihm verknüpfte doppelt-gebundene Atom. Gehören beide äusseren Liganden eines der doppelt-gebundenen Atome der gleichen Bezifferungseinheit an, so gilt der niedrigerbezifferte als Bezugsligand.

Beispiele:

- 2-Methyl-oct-3*t*-en-2-ol [E IV 1 2177]
 Cycloocta-1*c*,3*t*-dien [E IV 5 402]

- 9,11 α -Epoxy-5 α -ergosta-7,22 t -dien-3 β -ol [E III/IV 17 1574]
 3 β -Acetoxy-16 α -hydroxy-23,24-dinor-5 α -chol-17(20) t -en-21-säure-lacton
 [E III/IV 18 470]
 (3S)-9.10-Seco-ergostatrien-(5 t .7 c .10(19))-ol-(3) [E III 6 2832]

b) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einem doppelt-gebundenen endständigen Kohlenstoff-Atom oder vor der eine „offene“ Valenz an einem solchen Atom anzeigenden Endung -yl geben an, dass dieser Substituent bzw. der mit der „offenen“ Valenz verknüpfte Rest cis-ständig (*c*) bzw. trans-ständig (*t*) (vgl. § 2) zum Bezugsliganden (vgl. § 4a) ist.

Beispiele:

- 1 t ,2-Dibrom-propen [E IV 1 760]
 1 c ,2-Dibrom-3-methyl-buta-1,3-dien [E IV 1 1005]
 1-But-1-en- t -yl-cyclohexen [E IV 5 431]

c) Die Symbole *c* bzw. *t* hinter der Stellungsziffer 2 eines Substituenten am Äthylen-System geben die cis-Stellung (*c*) bzw. die trans-Stellung (*t*) (vgl. § 2) dieses Substituenten zu dem durch das Symbol *r* gekennzeichneten Bezugsliganden an dem mit 1 bezifferten Kohlenstoff-Atom an.

Beispiel:

- 1.2 t -Diphenyl-1 r -[4-chlor-phenyl]-äthylen [E III 5 2399]

d) Die mit der Stellungsziffer eines Substituenten (oder den Stellungsziffern einer im Namen durch ein Präfix bezeichneten Brücke eines Ringsystems) kombinierten Symbole *c* bzw. *t* geben an, dass sich der Substituent (oder die mit dem Stamm-Ringsystem verknüpften Brückenatome) auf der gleichen Seite (*c*) bzw. der entgegengesetzten Seite (*t*) der Bezugsfläche befinden wie der Bezugsligand. Dieser Bezugsligand ist durch Hinzufügen des Symbols *r* zu seiner Stellungsziffer kenntlich gemacht.

Bei einer aus mehreren isolierten Ringen oder Ringsystemen bestehenden Verbindung kann jeder Ring bzw. jedes Ringsystem als gesonderte Bezugsfläche für Konfigurationskennzeichen fungieren; die zusammengehörigen Sätze von Konfigurationssymbolen *r*, *c* und *t* sind dann im Namen der Verbindung durch Klammerung voneinander getrennt oder durch Strichelung unterschieden (s. Beispiele 1 und 2 unter Abschnitt e).

Beispiele:

- 1 r ,2 t ,3 c ,4 t -Tetrabrom-cyclohexan [E IV 5 76]
 1 r -Acetoxy-1,2 c -dimethyl-cyclopentan [E IV 6 111]
 [1,2 c -Dibrom-cyclohex- r -yl]-methanol [E IV 6 109]
 2 c -Chlor-(4 a r ,8 a t)-decahydro-naphthalin [E IV 5 313]
 5 c -Brom-(3 a t ,7 a t)-octahydro-4 r ,7-methano-inden [E IV 5 467]

e) Die mit einem (gegebenenfalls mit hochgestellter Stellungsziffer ausgestatteten) Atomsymbol kombinierten Symbole *r*, *c* oder *t* beziehen sich auf die räumliche Orientierung des indizierten Atoms relativ zur Bezugsfläche.

Beispiele:

1-[(4*aR*)-6*t*-Hydroxy-2*c*.5.5.8*a**t*-tetramethyl-(4*a**rH*)-decahydro-naphthyl-(1*t*)]-2-[(4*aR*)-6*t*-hydroxy-2*t*.5.5.8*a**t*-tetramethyl-(4*a**rH*)-decahydro-naphthyl-(1*t*)]-äthan [E III 6 4829]

2-[(5*S*)-6,10*c'*-Dimethyl-(5*rC*⁶,5*r'*C¹)-spiro[4.5]dec-6-en-2*t*-yl]-propan-2-ol [E IV 6 419]

(6*R*)-2*ξ*-Isopropyl-6*c*,10*ξ*-dimethyl-(5*rC*¹)-spiro[4.5]decan [E IV 5 352]

(1*rC*⁸,2*tH*,4*tH*)-Tricyclo[3.2.2.0^{2,4}]nonan-6*c*,7*c*-dicarbonsäure-anhydrid [E III/IV 17 6079]

- § 5. a) Die Präfixe *erythro* und *threo* zeigen an, dass sich die Bezugsliganden (das sind zwei gleiche oder jeweils die von Wasserstoff verschiedenen Liganden) an zwei einer Kette angehörenden Chiralitätszentren auf der gleichen Seite (*erythro*) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (*threo*) der Fischer-Projektion dieser Kette befinden.

Beispiele:

threo-Pentan-2,3-diol [E IV 1 2543]

threo-3-Hydroxy-2-methyl-valeriansäure [E IV 3 849]

erythro- α' -[4-Methyl-piperidino]-bibenzyl- α -ol [E.III/IV 20 1516]

- b) Das Präfix *meso* gibt an, dass ein mit einer geraden Anzahl von Chiralitätszentren ausgestattetes Molekül eine Symmetrieebene oder ein Symmetriezentrum aufweist. Das Präfix *racem.* kennzeichnet ein Gemisch gleicher Mengen von Enantiomeren, die zwei identische Chiralitätszentren oder zwei identische Sätze von Chiralitätszentren enthalten.

Beispiele:

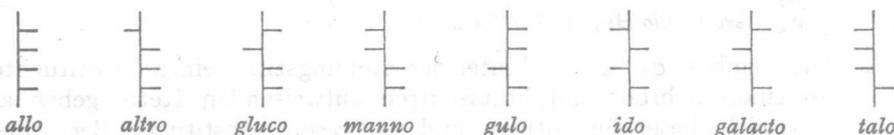
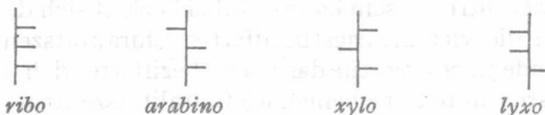
meso-Pentan-2,4-diol [E IV 1 2543]

meso-1,4-Dipiperidino-butan-2,3-diol [E III/IV 20 1235]

racem.-3,5-Dichlor-2,6-cyclo-norbornan [E IV 5 400]

racem.-(1*rH*,1'*r'H*)-Bicyclohexyl-dicarbonsäure-(2*c*.2'*c'*) [E III 9 4020]

- c) Die „Kohlenhydrat-Präfixe“ *ribo*, *arabino*, *xylo* und *lyxo* bzw. *allo*, *altro*, *gluco*, *manno*, *gulo*, *ido*, *galacto* und *talo* kennzeichnen die relative Konfiguration von Molekülen mit drei Chiralitätszentren (deren mittleres ein „Pseudoasymmetriezentrum“ sein kann) bzw. vier Chiralitätszentren, die sich jeweils in einer unverzweigten Kette befinden. In den nachstehend abgebildeten „Leiter-Mustern“ geben die horizontalen Striche die Orientierung der Bezugsliganden an der jeweils als Fischer-Projektion wiedergegebenen Kohlenstoffkette an¹⁾.



¹⁾ Das niedrigstbezahlte Atom befindet sich hierbei am oberen Ende der vertikal dargestellten Kette der Bezifferungseinheit.

Beispiele:

ribo-2,3,4-Trimethoxy-pentan-1,5-diol [E IV 1 2834]

galacto-Hexan-1,2,3,4,5,6-hexaol [E IV 1 2844]

- § 6. a) Die „Fischer-Symbole“ **D** bzw. **L** im Namen einer Verbindung mit einem Chiralitätszentrum geben an, dass sich der Bezugsligand (d. i. der von Wasserstoff verschiedene, nicht der durch den Namensstamm gekennzeichneten Kette angehörende Ligand) am Chiralitätszentrum in der Fischer-Projektion¹⁾ auf der rechten Seite (**D**) bzw. auf der linken Seite (**L**) der Kette befindet.

Beispiele:

D-Tetradecan-1,2-diol [E IV 1 2631]

L-4-Methoxy-valeriansäure [E IV 3 812]

- b) In Kombination mit dem Präfix *erythro* geben die Symbole **D** und **L** an, dass sich die beiden Bezugsliganden auf der rechten Seite (**D**) bzw. auf der linken Seite (**L**) der Fischer-Projektion¹⁾ befinden. Die mit dem Präfix *threo* kombinierten Symbole **D_g** und **D_s** geben an, dass sich der höherbezahlte (**D_g**) bzw. der niedrigerbezahlte (**D_s**) Bezugsligand auf der rechten Seite der Fischer-Projektion¹⁾ befindet; linksseitige Position des jeweiligen Bezugsliganden wird entsprechend durch die Symbole **L_g** bzw. **L_s** angezeigt.

In Kombination mit den in § 5c aufgeführten konfigurationsbestimmenden Präfixen werden die Symbole **D** und **L** ohne Index verwendet; sie beziehen sich dabei jeweils auf die Orientierung des höchstbezahlten (d. h. des in der Abbildung am weitesten unten erscheinenden) Bezugsliganden (die in § 5c abgebildeten „Leiter-Muster“ repräsentieren jeweils das **D**-Enantiomere).

Beispiele:

D-erythro-Nonan-1,2,3-triol [E IV 1 2792]

D_s-threo-1,4-Dibrom-2,3-dimethyl-butan [E IV 1 375]

L_g-threo-Hexadecan-7,10-diol [E IV 1 2636]

D-lyxo-Pentan-1,2,3,4-tetraol [E IV 1 2811]

6-Allyloxy-D-manno-hexan-1,2,3,4,5-pentaol [E IV 1 2846]

- c) Kombination der Präfixe **D-glycero** oder **L-glycero** mit einem der in § 5c in der zweiten Formelzeile aufgeführten, jeweils mit einem Fischer-Symbol versehenen Kohlenhydrat-Präfixe dienen zur Kennzeichnung der Konfiguration von Molekülen mit fünf in einer Kette angeordneten Chiralitätszentren (deren mittleres auch „Pseudoasymmetriezentrum“ sein kann). Dabei bezieht sich das Kohlenhydrat-Präfix auf die vier niedrigstbezahlten Chiralitätszentren, das Präfix **D-glycero** oder **L-glycero** auf das höchstbezahlte (d. h. in der Abbildung am weitesten unten erscheinende) Chiralitätszentrum.

Beispiel:

D-glycero-L-gulo-Heptit [E IV 1 2854]

- § 7. a) Die Symbole **c_F** bzw. **t_F** hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einer mehrere Chiralitätszentren aufweisenden Kette geben an, dass sich dieser Substituent und der Bezugssubstituent, der seinerseits durch das Symbol **r_F** gekennzeichnet wird, auf der gleichen Seite (**c_F**) bzw. auf den entgegengesetzten Seiten (**t_F**) der Fischer-

Projektion befinden. Ist eines der endständigen Atome der Kette Chiralitätszentrum, so wird der Stellungsziffer des „catenoiden“ Substituenten (d. h. des Substituenten, der in der Fischer-Projektion als Verlängerung an der Kette erscheint) das Symbol cat_F beigefügt.

- b) Die Symbole D_r bzw. L_r am Anfang eines mit dem Kennzeichen r_F ausgestatteten Namens geben an, dass sich der Bezugssubstituent auf der rechten Seite (D_r) bzw. auf der linken Seite (L_r) der in Fischer-Projektion¹⁾ wiedergegebenen Kette der Bezifferungseinheit befindet.

Beispiele:

Heptan-1,2 r_F ,3 c_F ,4 t_F ,5 c_F ,6 c_F ,7-heptaol [E IV 1 2854]

L_r -1 c_F ,2 t_F ,3 t_F ,4 c_F ,5 r_F -Pentahydroxy-hexan-1 cat_F -sulfonsäure [E IV 1 4275]

- § 8. Die Symbole *endo* bzw. *exo* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten eines Bicycloalkans geben an, dass der Substituent der niedriger bezifferten Nachbarbrücke zugewandt (*endo*) bzw. abgewandt (*exo*) ist.

Beispiele:

5*endo*-Brom-norborn-2-en [E IV 5 398]

2*endo*,3*exo*-Dimethyl-norbornan [E IV 5 294]

4*endo*,7,7-Trimethyl-6-oxa-bicyclo[3.2.1]octan-3*exo*,4*exo*-diol
[E III/IV 17 2044]

- § 9. Die Symbole *syn* bzw. *anti* hinter der Stellungsziffer eines Substituenten an einem Atom der höchstbezifferten Brücke eines Bicycloalkan-Systems oder einer Brücke über ein ortho- oder ortho/perianelliertes Ringsystem geben an, dass der Substituent der Nachbarbrücke zugewandt (*syn*) bzw. abgewandt (*anti*) ist, die das niedrigstbezifferte Ringatom aufweist.

Beispiele:

(3a*R*)-9*syn*-Chlor-1,5,5,8a-tetramethyl-(3a*t*,8a*t*)-decahydro-1*r*,4-methanoazulen [E IV 5 498]

5*exo*,7*anti*-Dibrom-norborn-2-en [E IV 5 399]

3*endo*,8*syn*-Dimethyl-7-oxo-6-oxa-bicyclo[3.2.1]octan-2*endo*-carbonsäure
[E III/IV 18 5363]

- § 10. a) Die Symbole α bzw. β hinter der Stellungsziffer eines ringständigen Substituenten im halbrationalen Namen einer Verbindung mit einer dem Cholestan [E III 5 1132] entsprechenden Bezifferung und Projektionsanlage geben an, dass sich der Substituent auf der dem Betrachter abgewandten (α) bzw. zugewandten (β) Seite der Fläche des Ringgerüsts befindet.

Beispiele:

3 β -Piperidino-cholest-5-en [E III/IV 20 361]

21-Äthyl-4-methyl-16-methylen-7,20-cyclo-veatchan-1 α ,15 β -diol [E III/IV 21 2308]

3 β ,21 β -Dihydroxy-lupan-29-säure-21-lacton [E III/IV 18 485]

Onocerandiol-(3 β ,21 α) [E III 6 4829]

- b) Die Symbole α_F bzw. β_F hinter der Stellungsziffer eines an der Seitenkette befindlichen Substituenten im halbrationalen Namen einer Verbindung der unter a) erläuterten Art geben an, dass sich der Substi-

tuent auf der rechten (α_F) bzw. linken (β_F) Seite der in Fischer-Projektion dargestellten Seitenkette befindet, wobei sich hier das niedrigstbezahlte Atom am unteren Ende der Kette befindet.

Beispiele:

16 α ,17-Epoxy-pregn-5-en-3 β ,20 β_F -diol [E III/IV 17 2137]

22 α_F ,23 α_F -Dibrom-9,11 α -epoxy-5 α -ergost-7-en-3 β -ol [E III/IV 17 1519]

- c) Die Symbole α und β , die zusammen mit der Stellungsziffer eines angularen oder eines tertiären peripheren Kohlenstoff-Atoms (im zuletzt genannten Fall ist hinter α bzw. β das Symbol H eingefügt) unmittelbar vor dem Stamm eines Halbrationalnamens erscheinen, kennzeichnen im Sinn von § 10a die räumliche Orientierung der betreffenden angularen Bindung bzw. (im Falle von αH und βH) des betreffenden (evtl. substituierten) Wasserstoff-Atoms, die entweder durch die Definition des Namensstamms nicht festgelegt ist oder von der Definition abweicht [Epimerie].

In gleicher Weise kennzeichnen die Symbole $\alpha_F H$ und $\beta_F H$ im Sinne von § 10b die von der Definition des Namensstamms abweichende Orientierung des (gegebenenfalls substituierten) Wasserstoff-Atoms an einem Chiralitätszentrum in der Seitenkette von Verbindungen mit einem Halbrationalnamen.

Beispiele:

5,6 β -Epoxy-5 β ,9 β ,10 α -ergosta-7,22 t -dien-3 β -ol [E III/IV 17 1573]

(25 R)-5 α ,20 αH ,22 αH -Furostan-3 β ,6 α ,26-triol [E III/IV 17 2348]

4 βH ,5 α -Eremophilan [E IV 5 356]

(11 S)-4-Chlor-8 β -hydroxy-4 βH -eudesman-12-säure-lacton [E III/IV 17 4674]

5 α .20 $\beta_F H$.24 $\beta_F H$ -Ergostanol-(3 β) [E III 6 2161]

- d) Die Symbole α bzw. β vor dem halbrationalen Namen eines Kohlenhydrats, eines Glykosids oder eines Glykosyl-Radikals geben an, dass sich der Bezugsligand (d. h. die am höchstbezahlten chiralen Atom der Kohlenstoff-Kette befindliche Hydroxy-Gruppe) und die mit dem Glykosyl-Rest verbundene Gruppe (bei Pyranosen und Furanosen die Hemiacetal-OH-Gruppe) auf der gleichen (α) bzw. der entgegengesetzten (β) Seite der Bezugsgeraden befinden. Die Bezugsgerade besteht dabei aus derjenigen Kette, die die cyclischen Bindungen am acetalischen Kohlenstoff-Atom sowie alle weiteren C,C-Bindungen in der entsprechend § 5c definierten Orientierung der Fischer-Projektion enthält.

Beispiele:

O²-Methyl- β -D-glucopyranose [E IV 1 4347]

Methyl- α -D-glucopyranosid [E III/IV 17 2909]

Tetra-O-acetyl- α -D-fructofuranosylchlorid [E III/IV 17 2651]

- e) Das Präfix *ent* vor dem halbrationalen Namen einer Verbindung mit mehreren Chiralitätszentren, deren Konfiguration mit dem Namen festgelegt ist, dient zur Kennzeichnung des Enantiomeren der betreffenden Verbindung. Das Präfix *rac* wird zur Kennzeichnung des einer solchen Verbindung entsprechenden Racemats verwendet.

Beispiele:

ent-(13 S)-3 β ,8-Dihydroxy-labdan-15-säure-8-lacton [E III/IV 18 138]

rac-4,10-Dichlor-4 βH ,10 βH -cadinan [E IV 5 354]

- § 11. a) Das Symbol ξ tritt an die Stelle von *cis*, *trans*, *c*, *t*, c_F , t_F , cat_F , *endo*, *exo*, *syn*, *anti*, α , β , α_F oder β_F , wenn die Konfiguration an der betreffenden Doppelbindung bzw. an dem betreffenden Chiralitätszentrum (oder die konfigurative Einheitlichkeit eines Präparats hinsichtlich des betreffenden Strukturelements) ungewiss ist.

Beispiele:

- 1-Nitro- ξ -cycloocten [E IV 5 264]
 1*t*,2-Dibrom-3-methyl-penta-1,3 ξ -dien [E IV 1 1022]
 (4*aS*-2 ξ ,5 ξ -Dichlor-2 ξ ,5 ξ ,9,9-tetramethyl-(4*ar*,9*at*)-decahydro-benzocyclohepten [E IV 5 353]
 D_r -1 ξ -Phenyl-1 ξ -*p*-tolyl-hexanpentol-(2*r_F*,3*t_F*,4*c_F*,5*c_F*,6) [E III 6 6904]
 6 ξ -Methyl-bicyclo[3.2.1]octan [E IV 5 293]
 4,10-Dichlor-1 β ,4 ξH ,10 ξH -cadinan [E IV 5 354]
 (1*1S*)-6 ξ ,12-Epoxy-4 ξH ,5 ξ -eudesman [E III/IV 17 350]
 3 β ,5-Diacetoxy-9,11 α ; 22 ξ ,23 ξ -diepoxy-5 α -ergost-7-en [E III/IV 19 1091]

- b) Das Symbol Ξ tritt an die Stelle von *D* oder *L*, das Symbol (Ξ) an die Stelle von (*R*) oder (*S*) bzw. von (*E*) oder (*Z*), wenn die Konfiguration an dem betreffenden Chiralitätszentrum bzw. an der betreffenden Doppelbindung (oder die konfigurative Einheitlichkeit eines Präparats hinsichtlich des betreffenden Strukturelements) ungewiss ist.

Beispiele:

- N*-{*N*-[*N*-(Toluol-sulfonyl-(4))-glycyl]- Ξ -seryl]-*L*-glutaminsäure [E III 11 280]
 (3 Ξ ,6*R*)-1,3,6-Trimethyl-cyclohexen [E IV 5 288]
 (1*Z*,3 Ξ)-1,2-Dibrom-3-methyl-penta-1,3-dien [E IV 1 1022]

- c) Die Symbole (Ξ_a) und (Ξ_p) zeigen unbekannte Konfiguration von Strukturelementen mit axialer bzw. planarer Chiralität (oder ungewisse Einheitlichkeit eines Präparats hinsichtlich dieser Elemente) an; das Symbol (ξ) kennzeichnet unbekannte Konfiguration eines Pseudoasymmetriezentrums.

Beispiele:

- (Ξ_a ,6 Ξ)-6-[(1*S*,2*R*)-2-Hydroxy-1-methyl-2-phenyl-äthyl]-6-methyl-5,6,7,8-tetrahydro-dibenz[*c,e*]azocinium-jodid [E III/IV 20 3932]
 (3 ξ)-5-Methyl-spiro[2.5]octan-dicarbonsäure-(1*r*,2*c*) [E III 9 4002]

- § 12. Das Symbol * am Anfang eines Artikels bedeutet, dass über die Konfiguration oder die konfigurative Einheitlichkeit des beschriebenen Präparats keine Angaben oder hinreichend zuverlässige Indizien vorliegen. Wenn mehrere Präparate in einem solchen Artikel beschrieben sind, ist deren Identität nicht gewährleistet.

Stereochemical Conventions

Contents

Prefix	Definition in §	Prefix	Definition in §
<i>allo</i>	5c, 6c	<i>c</i>	4a–e
<i>altro</i>	5c, 6c	c_F	7a
<i>anti</i>	3a, 9	<i>D</i>	6a, b, c
<i>arabino</i>	5c	D_g	6b
cat_F	7a	D_r	7b
<i>cis</i>	2	D_s	6b
<i>endo</i>	8	(<i>e</i>)	3b
<i>ent</i>	10e	(<i>E</i>)	3a
<i>erythro</i>	5a	<i>L</i>	6a, b, c
<i>exo</i>	8	L_g	6b
<i>galacto</i>	5c, 6c	L_r	7b
<i>gluco</i>	5c, 6c	L_s	6b
<i>glycero</i>	6c	<i>r</i>	4c, d, e
<i>gulo</i>	5c, 6c	r_F	7a, b
<i>ido</i>	5c, 6c	(<i>r</i>)	1a
<i>lyxo</i>	5c	(<i>R</i>)	1a
<i>manno</i>	5c, 6c	(R_a)	1b
<i>meso</i>	5b	(R_p)	1b
<i>rac</i>	10e	(<i>RS</i>)	1a
<i>racem.</i>	5b	(<i>s</i>)	1a
<i>rel</i>	1c	(<i>S</i>)	1a
<i>ribo</i>	5c	(S_a)	1b
<i>s-cis</i>	3b	(S_p)	1b
<i>seqcis</i>	3a	<i>t</i>	4a–e
<i>seqtrans</i>	3a	t_F	7a
<i>s-trans</i>	3b	(<i>z</i>)	3b
<i>syn</i>	3a, 9	(<i>Z</i>)	3a
<i>talo</i>	5c, 6c	α	10a, c, d
<i>threo</i>	5a	α_F	10b, c
<i>trans</i>	2	β	10a, c, d
<i>xylo</i>	5c	β_F	10b, c
		ξ	11a
		(ξ)	11c
		Ξ	11b
		(Ξ)	11b
		(Ξ_a)	11c
		(Ξ_p)	11c
		*	12

- § 1. a) The symbols (*R*) and (*S*) or (*r*) and (*s*) describe the absolute configuration of a chiral centre (centre of asymmetry) or pseudo-asymmetrical centre, following the Sequence-Rule and its applications. (*Cahn, Ingold, Prelog, Experientia* **12** [1956] 81; *Ang. Ch.* **78** [1966] 413, 419; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** [1966] 385, 390; *Cahn, Ingold, Soc.* **1951** 612; see also *Cahn, J. chem. Educ.* **41** [1964] 116, 508). To define the configuration of racemates of compounds with several chiral centres, the letter-pairs (*RS*) and (*SR*) are used; thus (*1RS,2SR*) specifies a racemate composed of the (*1R,2S*)-enantiomer and the (*1S,2R*)-enantiomer. (cf. *Cahn, Ingold, Prelog, Ang. Ch.* **78** 435; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** 404). The symbol (\overline{RS}) represents a mixture of approximately equal parts of the (*R*)- and (*S*)-enantiomers.

Examples:

- (*R*)-Propan-1,2-diol [E IV 1 2468]
 (*1R,3S,4S*)-3-Chlor-*p*-menthan [E IV 5 152]
 (3*aR*:4*S*:8*R*:8*aS*:9*s*)-9-Hydroxy-2.2.4.8-tetramethyl-decahydro-4.8-methano-azulen [E III 6 425]
 (*1RS,2SR*)-2-Amino-1-benzo[1,3]dioxol-5-yl-propan-1-ol [E III/IV 19 4221]
 (2 \overline{RS} ,4'*R*,8'*R*)- β -Tocopherol [E III/IV 17 1427]

- b) The symbols (*R_a*) and (*S_a*) or (*R_p*) and (*S_p*) are used (following the suggestion of *Cahn, Ingold* and *Prelog, Ang. Ch.* **78** 437; *Ang. Ch. int. Ed.* **5** 406) to define the configuration of elements of axial or planar chirality.

Examples:

- (*R_a*)-1,11-Dimethyl-5,7-dihydro-dibenz[*c,e*]oxepin [E III/IV 17 642]
 (*R_a*:*S_a*)-3.3'.6'.3''-Tetrabrom-2'.5'-bis-(((1*R*)-menthyloxy)-acetoxy)-2.4.6.2''.4''.6''-hexamethyl-*p*-terphenyl [E III 6 5820]
 (*R_p*)-Cyclohexanhexol-(1*r*.2*c*.3*t*.4*c*.5*t*.6*t*) [E III 6 6925]

- c) The symbol *rel* in an optically active compound containing at least two chirality centres designated (*R*) or (*S*) (see above) indicates that the configurational symbols specify a relative rather than an absolute configuration.

Example:

- (+)(*rel-1R:1'S*)-(1*rH*.1'*r'H*)-Bicyclohexyl-dicarbonsäure-(2*c*.2'*t*)
 [E III 9 4021]

- § 2. The prefixes *cis* or *trans* indicate that the given ligands are to be found on the same side (*cis*) or the opposite side (*trans*) of the reference plane. In olefins, this plane contains the two carbon nuclei of the double bond, and lies perpendicular to the nodal plane of the *p_z* orbitals of the pi bond. In cyclic compounds, the ring atoms are used to define the reference plane.

Examples:

- β -Brom-*cis*-zimtsäure [E III 9 2732]
 2-[4-Nitro-*trans*-styryl]-pyridin [E III/IV 20 3879]
 5-*cis*-Propenyl-benzo[1,3]dioxol [E III/IV 19 273]
 3-[*trans*-2-Nitro-vinyl]-pyridin [E III/IV 20 2887]
trans-2-Methyl-cyclohexanol [E IV 6 100]
cis-2-Isopropyl-bicyclohexyl [E IV 5 352]
 4*a*,8*a*-Dibrom-*trans*-decahydro-naphthalin [E IV 5 314]

§ 3. a) The symbols (*E*) and (*Z*) (modified where necessary by a locant) at the start of a name or part of a name define the configuration at the given double bond. They indicate that the reference ligands (see Sequence-Rule, § 1. a) at the doubly-bound atoms in question are to be found on the opposite (*E*) or same (*Z*) side of the reference plane, as defined in § 2.

Examples:

(*E*)-1,2,3-Trichlor-propen [E IV 1 748]

(*Z*)-1,3-Dichlor-but-2-en [E IV 1 786]

3endo-[(*Z*)-2-Cyclohexyl-2-phenyl-vinyl]-tropan [E III/IV 20 3711]

Piperonal-(*E*)-oxim [E III/IV 19 1667]

The designations (*E*) and (*Z*) have superseded the older nomenclature *seqtrans* and *seqcis*, as well as *anti* and *syn* in nitrogen-containing functional derivatives of aldehydes.

Examples:

(3*S*)-9,10-Seco-cholestadien-(5(10),7*seqtrans*)-ol-(3) [E III 6 2602]

1,1,3-Trimethyl-cyclohexen-(3)-on-(5)-*seqcis*-oxim [E III 7 285]

Perillaaldehyd-*anti*-oxim [E III 7 567]

b) The symbols (*e*) and (*z*) (modified where necessary by a locant) at the start of a name or part of a name define the configuration at a single bond between two trigonally disposed atoms which does not show free rotation. They indicate that the reference ligands (see Sequence-Rule, § 1. a) attached to the terminal atoms of the single bond in question are to be found on the opposite (*e*) or same (*z*) side of the reference line drawn between the two atoms.

Example:

(*e*)-*N*-Methyl-thioformamid [E IV 4 171]

The equivalent usage *s-trans* (= *single-trans*) and *s-cis* (= *single-cis*) is sometimes found in the literature.

§ 4. a) The symbols *c* or *t* following the locant of a double bond indicate that the reference ligands at the carbon termini of the double bond are *cis* (*c*) or *trans* (*t*) to one another (cf. § 2). The reference ligands in this case are defined at each of the Carbon atoms as those lateral (i. e. not in the reference plane) groups which belong to the same skeletal unit as the doubly-bound Carbon atom to which they are attached. Should both lateral groups at the carbon of a double bond belong to the same unit, then the group with the lowest-numbered atom as its point of attachment to the doubly-bound Carbon atom is defined as the reference ligand.

Examples:

2-Methyl-oct-3*t*-en-2-ol [E IV 1 2177]

Cycloocta-1*c*,3*t*-dien [E IV 5 402]

9,11*α*-Epoxy-5*α*-ergosta-7,22*t*-dien-3*β*-ol [E III/IV 17 1574]

3*β*-Acetoxy-16*α*-hydroxy-23,24-dinor-5*α*-chol-17(20)*t*-en-21-säure-lacton
[E III/IV 18 470]

(3*S*)-9,10-Seco-ergostatrien-(5*t*,7*c*,10(19))-ol-(3) [E III 6 2832]

b) The symbols *c* or *t* following the locant assigned to a substituent at a doubly-bound terminal Carbon atom indicate that the substituent is *cis* (*c*) or *trans* (*t*) (see § 2) to the reference ligand (see § 4. a). The