

A NOTAÇÃO ESTEREOQUÍMICA NO ÍNDICE DE NOMES DO CHEMICAL ABSTRACTS (1987)¹

Ricardo Bicca de Alencastro e Laura F. Wircker

Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro – Cidade Universitária
Ilha do Fundão – Bloco A – C.T. – C. Postal 1573; 21910 – Rio de Janeiro (RJ)

Recebido em 04/01/89

1. INTRODUÇÃO

O presente trabalho pretende examinar os critérios atualmente utilizados (1987) pelo "Chemical Abstracts" (daqui para a frente referido pelas iniciais CA) no estabelecimento da nomenclatura estereoquímica de compostos orgânicos em seu Índice de Nomes. Estas notas baseiam-se, primariamente, no Apêndice IV, "Selection of Index Names for Chemical Substances", Index Guide (1987 – 2º volume)², do CA, nos índices dos volumes anteriores correspondentes aos nono, décimo primeiro períodos de aquisição (Índice Coletivos) e referências específicas³⁻⁶. Nosso objetivo é alertar os usuários potenciais do CA para certos aspectos de Regras nem sempre muito claramente definidas e tentar tornar mais fácil para o leitor de língua portuguesa o processo de codificação e descodificação da estrutura espacial representado pela notação estereoquímica. Não pretendemos discutir neste trabalho as Regras de Nomenclatura do CA, como um todo, nem as modificações que sofreram através do tempo. Basta lembrar que a última grande alteração destas normas foi realizada no período correspondente ao 9º Índice Coletivo (1972-1976). Estas modificações foram efetuadas por exigência das necessidades impostas pelo seu caráter muito particular de índice. Com efeito, bases de dados (índices, por exemplo) extensas como as do CA têm de se fixar rigidamente em critérios tais que os nomes devam: (a) ser unívocos e sem ambigüidades, isto é, a cada nome uma fórmula e vice-versa (os sistemas de nomenclatura aceitos pela IUPAC permitem, com frequência, diversos nomes "corretos" para os compostos); (b) ser de fácil construção e de fácil tradução (nome-estrutura); (c) ser facilmente encontrados pelos usuários; (d) poder ser colocados junto a nomes semelhantes, de modo a permitir a procura mais rápida de compostos de estrutura similar por indivíduos ou por sistemas computadorizados, e, finalmente, (e) ser coerentes com os sistemas de nomenclatura aceitos internacionalmente. Assim, os nomes CA satisfazem as exigências da nomenclatura IUPAC (nomenclatura conjuntiva), às quais se adicionam critérios próprios de sua necessidade e função como índice. Nos períodos que se sucederam (1976-1987) muito poucas alterações foram efetuadas. O leitor interessado deverá consultar o Index Guide (1987) para mais detalhes.

Em uma primeira parte definem-se os descritores estereoquímicos utilizados pelo CA e, quando necessário, comparam-se com os procedimentos IUPAC⁷. Em outra parte

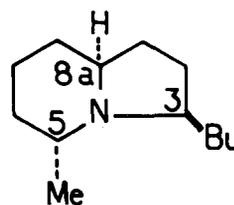
descrevem-se os critérios de uso destes descritores. Os exemplos são mantidos em um mínimo. Os nomes CA são apresentados na língua original, por razões práticas. Os nomes IUPAC que os acompanham, para fins de comparação, são apresentados na língua vernácula. O assunto é complexo e tentamos apresentá-lo do modo mais simples que encontramos. O leitor principiante achará um resumo dos procedimentos IUPAC na referência 8. Os autores esperam que a presente contribuição tenha o mesmo acolhimento de trabalhos anteriores⁷⁻¹¹ e que possa vir a ser útil aos estudiosos da Química.

2. PRINCÍPIOS E DEFINIÇÕES

A estereoquímica é expressa no CA (1987) de três maneiras diferentes. No caso de compostos em que se utiliza a nomenclatura sistemática (inclusive alguns produtos naturais com apenas um ou dois centros quirais), a estereoquímica é expressa por descritores, colocados após o nome, de forma destacada. A cada centro quiral corresponde um descritor.

NOME
DESCRITORES

Exemplo:



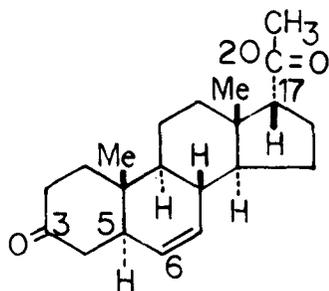
(CA 81:105225c)

indolizine, 3-butyl octahydro-
-5-methyl-,
(3 α , 5 β , 8 $\alpha\beta$)-

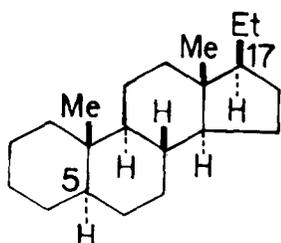
Observação: veja adiante a definição e aplicação dos descritores α e β .

No caso dos produtos naturais, especialmente quando muitos centros quirais estão presentes, prefere-se o uso de nomes semitriviais, isto é, os compostos são nomeados com base em um composto principal de estereoquímica conhecida (esteoprincipal), familiar aos usuários dos diversos grupos de compostos da área (alcalóides, carboidratos, esteróides, terpenos, etc.). Os descritores registram apenas as alterações de estereoquímica entre o composto a ser nomeado e o composto principal.

Exemplo:



CA: pregn-6-ene-3,20-
-dione,
(5 α ,17 α)-



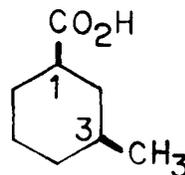
pregnane
(estereoprincipal)

Observação: a configuração é a mesma nas posições 8, 9, 10, 13 e 14. A configuração da posição 5 é dita confirmada ("added stereochemistry") porque podem existir os dois isômeros da posição 5. A configuração em 17 é oposta à do composto estereoprincipal. As regras próprias encontram-se bem desenvolvidas nos diversos "Index Guides" e não serão discutidas aqui.

O terceiro caso é o de compostos de coordenação, em que se usam descritores especiais, que permitem representar o arranjo dos ligantes em torno do átomo central. As regras próprias encontram-se nos "Index Guides" e estão fora do escopo deste trabalho.

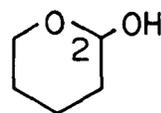
Estamos interessados, portanto, apenas no primeiro caso, isto é, na descrição estereoquímica de compostos orgânicos listados no CA por seus nomes sistemáticos. A descrição é feita em duas partes. Na primeira, escolhe-se *um* centro quiral de referência e indica-se, por um símbolo apropriado, sua *configuração absoluta*, ou, então, indica-se a rotação ótica da substância. Na segunda parte, relacionam-se *todos* os centros quirais da molécula (configuração relativa).

Exemplo:



CA: cyclohexanecarboxyl-
ic acid, 3-methyl-,
(1R-cis)-

No exemplo acima, a configuração absoluta de um dos centros (ver adiante as normas de escolha deste centro), determinada pelas Regras de seqüência^{7,8,12,13}, é representada pelo descritor 1R. A relação entre os dois centros é dada pela expressão *cis* (ver adiante a definição e as normas de uso). A adoção desta metodologia permite a distinção, desejável em um índice, entre as estereoquímicas absoluta e relativa.

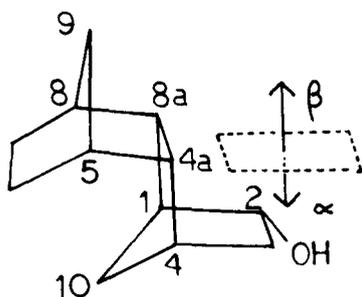


CA: 2H-pyran-2-ol,
tetrahydro-,
(-)-

No caso acima, a configuração é desconhecida ou não foi definida no documento original. O sinal de rotação é usado para distinção dos enantiômeros.

A partir do 9º Índice Coletivo, o uso de descritores do tipo α , β , *cis*, *trans*, *exo*, *endo*, *sin* e *anti* foi limitado à descrição da estereoquímica relativa e restrito a certos sistemas bem definidos. Assim, *cis* e *trans* só são usados em sistemas cíclicos e *endo*, *exo*, *sin* e *anti*, restritos a certos sistemas bicíclicos. No exemplo abaixo, cujos isômeros foram descritos até o 8º Índice Coletivo com o auxílio dos prefixos *endo* e *exo*, sem especificação clara de qual grupo era "endo" ou "exo" em relação a qual, passou-se a utilizar, a partir do 9º Índice Coletivo, outro sistema de nomenclatura, em que as pontes metano são tratadas como substituintes.

tes e a especificação da estereoquímica deixa de ser ambígua.



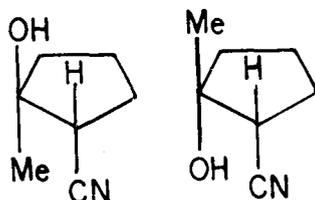
CA: 1,4:5,8-dimetano-naphtalen-2-ol, decahydro-,
(1 α , 2 α , 4 α , 4a β , 5 β , 8 β , 8a β) -

IUPAC: (1S, 2R, 4S, 4aS, 5R, 8S, 8aS)-1,4:5,8-dimetano-deca-hidronaftaleno-2-ol

Observação: neste caso (ver adiante) o centro de referência é o átomo 1. A ponte metano 1,4, substituinte primeiramente listado no nome, decide o lado α do plano de referência. Sucessivamente, OH em 2 é α , a ponte metano em 4 é β , o hidrogênio em 4a é β , a ponte metano em 5 e 8 é α e o átomo de hidrogênio em 8a é β . A estereoquímica é unívoca.

Os descritores relativos cis, trans, exo, endo, sin, anti, α , β , R*, S*, E e Z são usados a partir do 9º Índice Coletivo de acordo com o que se segue:

— cis e trans estão restritos a estruturas cíclicas com dois átomos estereogênicos. Diz-se que um átomo é estereogênico quando a permutação de dois dos átomos ou grupos de átomos a ele ligados leva a um composto diferente do primeiro. Dá-se o prefixo cis ao isômero que tem substituintes de maior prioridade, segundo as regras de seqüência, no mesmo lado do plano de referência.

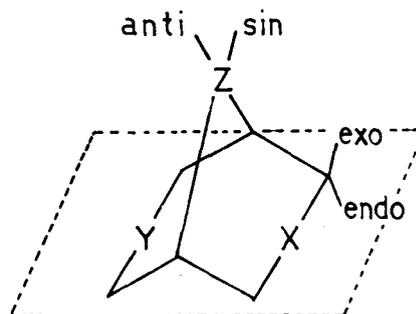


trans cis

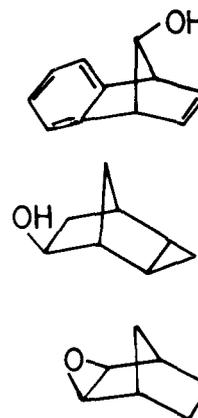
CA: cyclopentanecarbonitrile, 2-hydroxy-2-methyl-,

IUPAC: 2-hidróxi-2-metil-ciclo-pentanocarbonitrila

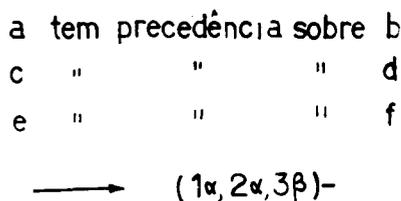
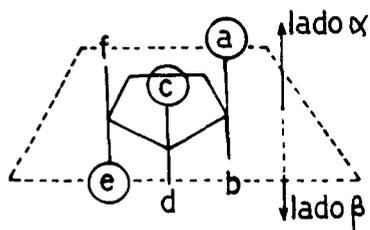
— endo e exo são utilizados apenas para descrever a posição de substituintes nas pontes X e Y de compostos bicíclicos com a estrutura da figura abaixo, em que $X \geq Y > Z > \text{zero}$. O isômero exo tem a configuração na qual o substituinte que tem a maior prioridade segundo as Regras de Seqüência está do mesmo lado que a ponte Z, em relação ao plano de referência. Os prefixos sin e anti são usados para descrever a posição relativa dos substituintes da ponte Z. O isômero sin tem o substituinte de maior prioridade voltado para a ponte X. Quando $X = Y$, escolhe-se como ponte X aquela que tem o substituinte principal e, se isto não for possível, aquela que tem o substituinte de maior prioridade^{8,11}.



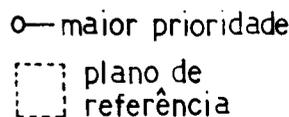
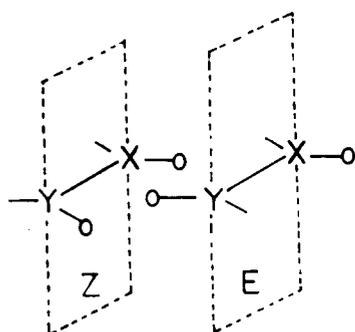
Observação: a definição acima dos sistemas bicíclicos em que os prefixos endo, exo, anti e sin podem ser utilizados é bastante restrita. Assim, estes prefixos não podem ser usados em casos como, por exemplo,



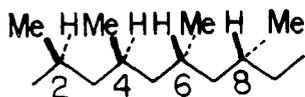
— Os descritores α e β são empregados, para descrever a estereoquímica de substituintes em compostos cíclicos. A numeração do anel segue as regras da nomenclatura de substituição. O lado α do plano de referência é aquele que tem o substituinte de maior prioridade segundo as Regras de Seqüência, dentre os dois ligados à posição estereogênica de menor número.



Os descritores *E* e *Z*^{7,8,12} são utilizados para representar isômeros geométricos resultantes de ligações duplas. *Z* é usado para o estereoisômero que tem os grupos de maior prioridade segundo as Regras de Sequência do mesmo lado do plano de referência.



— *R** e *S** são semelhantes a *R* e *S*^{7,8,12}. São descritores de estereoquímica relativa (ao contrário de *R* e *S* que descrevem a estereoquímica absoluta) e, portanto, só fazem sentido se usados em relação a um centro de referência, o átomo estereogênico de menor número (ou o citado em primeiro lugar no nome, ver adiante), que recebe arbitrariamente o símbolo *R**. Dizer que outro centro quiral da molécula é *R** significa dizer que tem a mesma configuração do centro de referência (não importa se *R* ou *S*). Dizer que é *S**, significa dizer que tem configuração oposta à do centro de referência.



CA: decane, 2, 4, 6, 8-tetrametil-,

[4*R*-(4*R**, 6*R**, 8*R**)]-

IUPAC: (4*R*, 6*R*, 8*R*)-2, 4, 6, 8-tetrametil-decano

Observação: no exemplo acima o centro de referência é o átomo 4 (ver adiante) cuja configuração absoluta é *R*. Como centro de referência recebe o símbolo *R**. Os demais centros têm a mesma configuração absoluta do centro quiral de referência e recebem os símbolos *R**, *R**.

3. USO DOS DESCRITORES ESTEREOQUÍMICOS

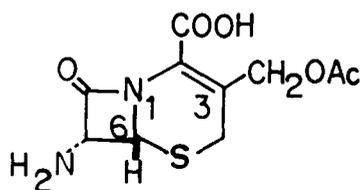
Dois casos se apresentam para fins de nomenclatura. No primeiro caso, quando apenas um elemento quiral está presente, usa-se um dos descritores, *R* ou *S*, entre parênteses, seguido de um hífen.

No segundo caso, mais de um elemento quiral está presente, e escolhe-se um centro de referência por um dos critérios descritos a seguir e a ele se atribui um descritor de configuração absoluta *R* ou *S*. Os demais centros são descritos por símbolos de configuração relativa.

3.1 CRITÉRIOS DE ESCOLHA DO CENTRO DE REFERÊNCIA

A. O centro de referência é o *centro quiral de menor número* nas seguintes situações:

1 — Quando apenas dois átomos estereogênicos ocorrem em um anel de oito átomos ou menos, ou em um sistema formado por estes anéis. Neste caso, o segundo centro quiral é indicado pelos descritores *cis* ou *trans*.



Ac=COCH₃

CA: 5-thia-1-azabicyclo[4.2.0]oct-2-ene-2-carboxylic acid, 3-[(acetilóxi)methyl]-7-amino-8-oxo-,

(6*R*-trans)-

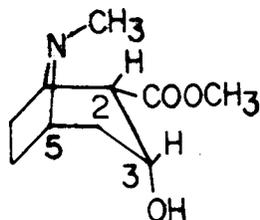
IUPAC: ácido (6*R*, 7*S*)-

-3-[(acetilóxi)methyl]-7-amino-8-oxo-5-thia-1-azabicyclo[4.2.0]octa-2-eno-2-carboxílico

Observação: neste caso o anel tem oito átomos e para efeitos de estereoquímica relativa não se consideram os átomos de enxofre e nitrogênio (que estão no plano "médio" do anel).

2 — Quando se usam os prefixos *endo*, *exo*, *sin* e *anti*,

desde que só existam centros quirais nos átomos do sistema bicíclico.

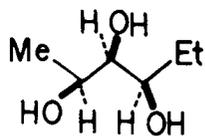


CA: 8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylic acid, 3-hydroxy-8-methyl-, methyl ester,

[1R-(endo,endo)]-

IUPAC: (1R,2S,3R,5S)-3-hidróxi-8-metil-8-azabicyclo[3.2.1]octano-2-carboxilato de metila

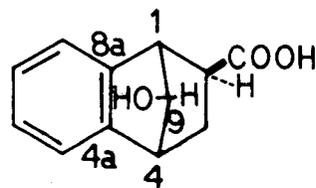
3 – Quando existem mais de dois centros e o caso 2 não se aplica, usam-se os descritores α e β , ou, se isto não é possível, R^* e S^* . R^* e S^* são utilizados para espiro-átomos, em anéis fundidos, átomos de ponte e em sistemas abertos.



CA: 2,3,4-hexanetriol, [2S-(2R*,3S*,4S*)]-

IUPAC: (2S,3R,4R)-2,3,4-hexanotriol

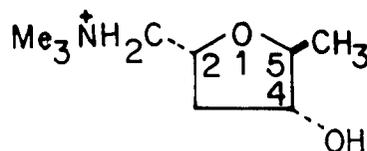
Observação: ao centro quiral do átomo 2 (que tem configuração absoluta S) dá-se, *arbitrariamente*, o descritor R^* . Dizer que os centros quirais 3 e 4 são S^* , é dizer que têm configuração absoluta oposta à do centro 2. O centro de referência, como $2R^*$, deve ser mencionado no descritor completo.



CA: 1,4-methanonaphthalene-2-carboxylic acid, 1,2,3,4-tetrahydro-9-hydroxy-, [1S-(1 α ,2 α ,4 α ,9R*)]-

IUPAC: ácido (1S,2S,4R,9S)-9-hidróxi-1,2,3,4-tetrahidro-1,4-metano-naftaleno-2-carboxílico

Observação: aqui não se aplica o caso 2, por causa do anel aromático. Ao carbono 1 dá-se, *arbitrariamente*, o descritor R^* . Dizer que o centro quiral 9 é R^* significa dizer que sua configuração é a mesma do que a do centro 1. Neste caso, a descrição dos demais centros, inclusive o centro de referência, é feita com o auxílio dos descritores α e β .



CA: 2-furanmethanaminium, tetrahydro-4-hydroxy-N,N,5-tetramethyl,

[2R-(2 α ,4 α ,5 β)]-

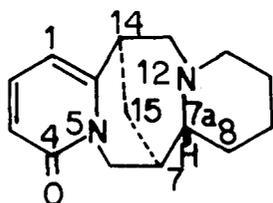
IUPAC: íon (2R,4R,5S)-4-hidróxi-N,N,5-tetrametil-2-tetrahidro-furanometamínio

Observação: Neste exemplo, o centro de referência é R (portanto, 2R). Aqui aplicam-se os descritores α e β , não cabendo R^* e S^* . O lado α é determinado pelo substituinte de maior prioridade.

B. O centro de referência é a primeira posição α citada no nome nas seguintes situações:

4 – Quando, em sistemas cíclicos, os casos 1 a 3, não se aplicam, usam-se os descritores α e β . R^* e S^* são usados

para centros quirais em espiro-átomos, em anéis fundidos, átomos de ponte e anéis de mais de oito átomos.



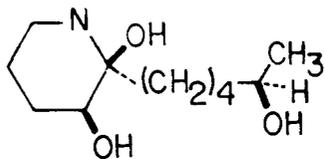
CA: 7,14-methano-4H,6H-
-dipyrido[1,2-a:1',2'-e]-
-[1,5]diazocin-4-one-7,
7a,8,9,10,11,13,14-octa-
-hydro-,

(7 α ,7a β ,14 α)-

IUPAC: (7R,7aS,14S)-7,7a,
8,9,10,11,13,14-octa-hi-
dro-7,14-metano-4H,
6H-dipyrido[1,2-a:1',2'-
e]-[1,5]diazocino-4-ona

Observação: a ponte metano (7, 14) é listada primeiro no nome e determina o lado α do plano de referência. Os centros 7 e 14 são α e o centro 7a, β (o átomo de hidrogênio está do lado oposto. Os demais átomos deste centro estão no plano de referência e não são considerados).

5 – Quando o caso 4 é aplicável, porém existem outros centros quirais em cadeias laterais, o anel tem precedência para fins de estereoquímica. O primeiro centro quiral citado (no anel) é α (e implicitamente R*). Para os centros quirais do anel usam-se os descritores α e β . Para os centros quirais das cadeias laterais, anotados entre parênteses, usam-se os descritores R* e S*.

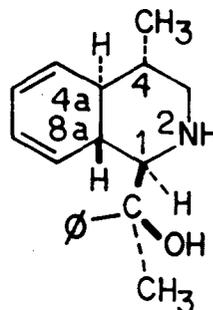


CA: 2,3-piperidinediol, 2-
-(5-hydroxyhexyl)-,

[2S-[2 α ,2(S*),3 α]]-

IUPAC: (2S,3S,5'R)-2-
-(5'-hidróxi-hexil)-2,
3-piperidinodiol

Observação: o centro de referência é o átomo α primeiro citado no nome, no caso o átomo 2 que tem a configuração absoluta S, tem arbitrariamente a configuração R* e determina (OH) o lado α do plano de referência. Daí, 3 α . O centro quiral da cadeia lateral tem configuração absoluta (R) oposta à do centro de referência, daí S* entre parênteses, precedido do número 2, átomo de ligação entre a cadeia lateral e o anel.



CA: 1-isoquinolinemethanol,
1,2,3,4,4a,8a-hexahydro-
- α ,4-dimethyl- α -phenyl,

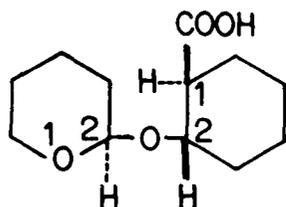
[1R-[1 α (S*),4 β ,4a β ,8a α]]-

IUPAC: (1S,1'R,4'R,4'aS,8'aR)-
-1-fenil-1-(1',2',3',4',4'a,8'a)-
-hexa-hidro-4'-metil-i-
soquinolinil)-etanol

Observação: o centro de referência, primeiro citado no nome, é o centro 1, que tem a configuração absoluta R, a configuração relativa R*, e determina o lado α do plano de referência. Daí 1 α , 4 β , 4a β e 8a α . Nos casos de 4a e 8a, o átomo de hidrogênio determina a estereoquímica, já que os demais substituintes estão no plano de referência e não são considerados. A cadeia lateral em 1 tem um centro quiral de configuração oposta à do centro de referência, daí S*, entre parênteses.

C. O centro de referência é o centro que tem o *substituinte com maior precedência nas Regras de Sequência* nas seguintes situações:

6 – Quando dois centros quirais (pelo menos) não estão no mesmo anel em um sistema de anéis.

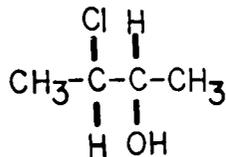


CA: cyclohexanecarboxylic acid, 2-[(tetrahydro-2H-pyran-2-yl)oxy]-, [1S-[1 α ,2 β (S*)]]-

IUPAC: ácido (1S,2S,2'R)-2-(tetra-hidro-2H-pirano-2-ilóxi)-ciclo-hexanocarboxílico

Observação: o anel que contém dois centros quirais tem a precedência. Nele, o centro de referência é o átomo 1, que tem configuração absoluta S e determina o lado α . Daí 1 α , 2 β . O outro anel é tratado como substituinte, tem um centro quiral apenas, de configuração oposta, R, daí S* . Não é necessário numerar.

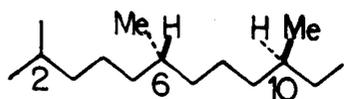
7 - Quando existem dois centros quirais em um sistema acíclico (o caso 3 não se aplica). Usam-se R* e S* sem números de localização.



CA: 2-butanol,3-chloro-, [S-(R*,R*)]-

IUPAC: (2S,3S)-3-cloro-2-butanol

Observação: o centro de referência é o átomo 3, de configuração absoluta S, ao qual se atribui o símbolo R* . O outro centro tem a mesma configuração, daí R* .

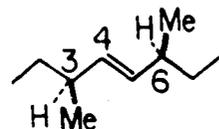


CA: dodecane, 2,6,10-trimethyl-, [S-(R*,R*)]-

IUPAC: (6S,10S)-2,6,10-trimetil-dodecano

Observação: o centro de referência é o átomo 10.

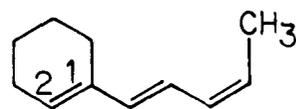
D. No caso de existirem, em um mesmo composto, centros quirais e ligações duplas, usam-se os descritores apropriados, na ordem decrescente de prioridade. A determinação do centro de referência segue as regras anteriores.



CA: 4-octene,3,6-dimethyl-, [S-(R*,R*)-E]-

IUPAC: (3S,4E,6S)-3,6-dimetil-4-octeno

Observação: aplica-se o caso 7 porque só existem dois centros quirais. O centro de referência é 3 ou 6 (são equivalentes) e têm a mesma configuração absoluta, daí, R*, R* . Se um dos dois centros tivesse configuração R, teria a preferência¹² . A configuração em torno da ligação dupla é citada após os descritores de quiralidade.

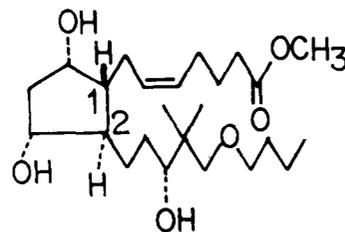


CA: cyclohexene, 1-(1,3-pentadienyl)-,

(E,Z)-

IUPAC: (1E,3Z)-1-(1,3-pentadienil)-ciclo-hexeno

Observação: a relação entre as duas ligações duplas é citada na ordem decrescente de prioridade.



CA: 5-heptenoic acid, 7-(2-(5-butoxy-3-hydroxy-4,4-dimethylpentyl)-3,5-dihydroxycyclopentyl)-, methyl ester,-

[1R-[1 α (Z),2 β (R*),3 α ,5 α]]-

IUPAC: (1'R,2'R,3'R,3'R,5'S,
5Z)-7-(2'-(5"-butóxi-4"
4"-dimetil-3"-hidróxi-pen-
til)-3',5'-di-hidróxi-ciclo-
pentil)-hepta-5-enoato de
metila

Observação: no nome IUPAC, os índices primos e duplos primos podem ser eliminados, se isto não causar dúvida. Não é o caso aqui. No nome CA, isto é possível. Para a estereoquímica do nome CA, aplica-se o caso 3. O centro quiral de referência é o átomo 1 do anel, que tem a configuração absoluta R e determina o lado α do plano de referência. Daí, 1 α , 2 β , 3 α , 5 α . A cadeia lateral do centro 1 contém uma ligação dupla de configuração Z. A cadeia lateral do centro 2 contém um centro quiral R*, isto é, de configuração absoluta idêntica à do centro de referência.

4. OBSERVAÇÕES FINAIS

Os procedimentos descritos acima definem a estereoquímica absoluta e relativa da maior parte dos casos. O assunto é complexo e problemas mais complicados de nomenclatura estereoquímica devem ser resolvidos com o auxílio dos textos originais. Isto se aplica, igualmente, às substâncias de campos especializados da Química Orgânica.

CEPG-UFRJ, CNPq.

REFERÊNCIAS

- ¹ Apresentado, em parte, no IV^o Encontro Regional de Química do Rio de Janeiro, SBQ-RJ, maio de 1988, RJ.
- ² "Chemical Abstracts-Index Guide", Chemical Abstracts Service, Columbus, Ohio (1987).
- ³ Blackwood, J.E.; Giles, Jr., P.M.; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* (1975), 15, 67.
- ⁴ Donaldson, N.; Powell, W.H.; Rowlett, Jr., R.J.; White, R.N.; Yorka, K.V.; *J. Chem. Doc.* (1974), 14, 3.
- ⁵ Robiette, M.G.; in Lees, R.; Smith, A.; "Chemical Nomenclature Usage"; Ellis Horwood Ltd.; Chichester (1983).
- ⁶ Fabre, H.; "Introduction à la Nomenclature pour la Chimie Organique"; Presses de l'Université de Montréal; Montréal (1987).
- ⁷ Bicca de Alencastro, R.; Wircker, L.F.; *Química Nova* (1984), 7, 150.
- ⁸ Bicca de Alencastro, R.; Mano, E.B.; "Nomenclatura de Compostos Orgânicos"; Editora Guanabara; Rio de Janeiro (1987).
- ⁹ Bicca de Alencastro, R.; *Química Nova* (1982), 5, 67.
- ¹⁰ Bicca de Alencastro, R.; Wircker, L.F.; *Química Nova* (1985), 8, 156.
- ¹¹ Bicca de Alencastro, R.; Wircker, L.F.; *Química Nova* (1986), 9, 19.
- ¹² IUPAC-Organic Chemistry Nomenclature Committee; *J. Org. Chem.* (1970), 35, 2849; *Pure Appl. Chem.* (1976), 45, 11.
- ¹³ Cahn, R.S.; Ingold, C.K.; Prelog, V.; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* (1966), 5, 385.