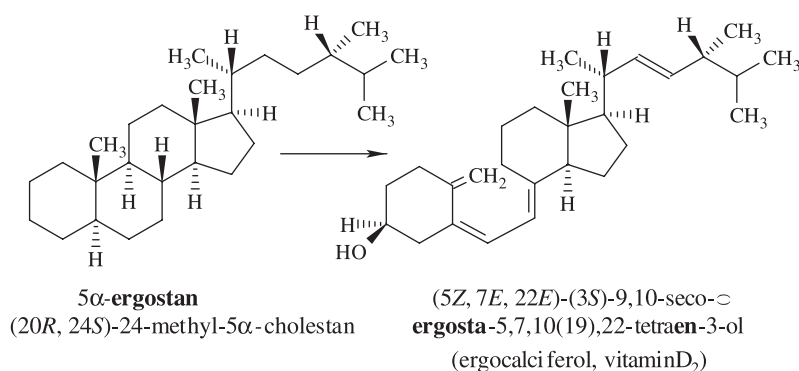


# 1. Nomenklaturprincipper



## 1.1. Indledning

Dansk kemisk nomenklatur, som den har været fremstillet og benyttet de seneste årtier i lærebøger, vejledninger i navngivning af kemiske forbindelser (se litteraturlisten i kap. 9), fagtidsskrifter og myndighedsdokumenter (se samme liste) har for så vidt angår de generelle *principper* stort set uden diskussion tilstræbt at følge de i samme periode udsendte anbefalinger fra IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) vedrørende international (dvs. engelsksproget) nomenklatur, navnlig [1] og [2]. Tilpasningen til dansk af *stavemåderne* for kemiske navne har derimod været genstand for periodevis livlig debat i fagpressen.

Nærværende bog er baseret på IUPAC's nyeste vejledninger [2-7; se også litteraturlisterne til kap. 2 og 3 og tabellerne]. De overordnede træk ved IUPAC-nomenklaturen, tillempt til dansk, gennemgås i 1.3 (konstruktionsmåder for kemiske navne), kap. 2 (grundbestanddele af de kemiske navne) og endelig kap. 3, som indeholder bemærkninger om navngivning af bestemte klasser af forbindelser. En stor del af det konkrete stof er indarbejdet i de 17 tabeller, som i almindelighed kan benyttes uafhængigt af den øvrige fremstilling.

Danske stavemåder for kemiske navne er valgt, så de lægger sig tæt op ad de internationale (decan, phthalsyre, chlor, iod, silicat, quinolin osv.). Dette valg er truffet bl.a. under hensyntagen til, at sådanne stavemåder forlængst er indarbejdet i lærebøger, som vil blive benyttet de næste mange år i det gymnasiale uddannelsessystem, og i myndighedsdokumenter, der vedrører kemiske forbindelser.

I det efterfølgende menes med IUPAC-nomenklatur efter omstændighederne enten den internationale (engelske) version eller den her lancerede danske version. I stofnavnelisten *Kemiske Ord* er de navne, der anføres efter opslagsordene, danske IUPAC-navne, medmindre andet fremgår.

I 1.4 og 1.5 berører vi kort andre nomenklatorsystemer, især det af *Chemical Abstracts Service* benyttede.

## 1.2. IUPAC

Internationalt samarbejde om systematisk nomenklatur i den forstand, vi kender det i dag, har bestået i over 100 år. Milepæle var konferencerne i Genève i 1892 og i Liège i 1930, den sidste i regi af *International Union of Chemistry*, der blev dannet i 1919. Denne organisation skiftede i 1949 navn til IUPAC (jf. 1.1).

IUPAC er i dag en omfattende, ikke-kommerciel virksomhed med ideelle formål, og dens nomenklaturdivision er reelt det eneste internationale forum, hvori normativt nomenklaturarbejde udføres. IUPAC har imidlertid ikke nogen autoritet ud over den, som kemikersamfundet (dvs. forskere, undervisere, tidsskriftredaktører, miljømyndigheder osv.) giver det, og de resulterende nomenklaturvejledninger indeholder kun anbefalinger (og det modsatte), ikke regler med nogen juridisk gyldighed.

IUPAC erkender også, at andre instanser kan have brug for at udvikle deres egne nomenklatorsystemer, eksempelvis *Beilstein-Institut* og *Chemical Abstracts Service* (vedr. dette sidste, se 1.4). IUPAC samarbejder i øvrigt med andre internationale organer, ikke mindst *IUPAP* (International Union of Pure and Applied Physics) og *IUBMB* (International Union of Biochemistry and Molecular Biology, tidligere blot IUB); sidstnævnte organisation står vidtgående for den biokemiske nomenklatur [5,6].

Megen information om IUPAC og stedse flere af dets publikationer kan findes på [www.iupac.org](http://www.iupac.org).

En fremstilling af udviklingen fra Genève-konferencen frem til IUPAC's arbejde i dag er givet i [8].

## 1.3. IUPAC-nomenklatur

### 1.3.1. Generelle bemærkninger

Den generelle IUPAC-nomenklatur er ikke ét sammenhængende system. Man kan snarere beskrive den som en samling af *anbefalede konstruktionsmåder* for navne, hver for sig udsprunget af en tradition, og en samling *anbefalede navnekomponenter* (navne på stamforbindelser, præfikser for substituentgrupper mv.). Navne konstrueret ud fra anbefalede komponenter ved hjælp af anbefalede konstruktionsmåder vil vi her kalde **systematiske navne**. IUPAC-nomenklaturen rummer også anbefalede eller i hvert fald »accepterede« eller »bibeholdte« navne, der ikke er systematiske, fx

hydrazin svarende til det systematiske diazan;  
iodoform svarende til triiodmethan;  
myresyre svarende til methansyre;  
alanin svarende til 2-aminopropansyre;  
ozon svarende til trioxygen;

sådanne navne og systematiske navne vil vi tilsammen kalde **systemnavne**.

Systemnavne, der ikke er fuldt systematiske, kan være trivialnavne (jf. 1.3.2) som de ovennævnte fem eller *halvsystematiske navne*, som fx phenylalanin, arsensyre, 2-deoxyribose, dithiomyresyre. Navne, der ikke accepteres som systemnavne, kan igen være trivialnavne (fx sprit, soda), halvsystematiske navne (thioacetone, salpetersyreanhydrid) eller systematiske navne, der er baseret på en nu forladt systematik (kobberforklor, kulstoft natron, hexylmercaptan) eller som simpelthen er forkerte (se 1.3.2). De nævnte eksempler kan her som i det følgende alle slås op i *Kemiske Ord*.

En konsekvens af, at IUPAC-nomenklaturen består af forskellige delnomenklaturer, er, at den ofte ikke fører til ét bestemt navn som det foretrukne systemnavn for en given kemisk forbindelse. Et velkendt stof som  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$  kan uden videre inden for rammerne af IUPAC's vejledninger tildeles følgende navne:

diethylether, oxybis(ethan), ethoxyethan, 3-oxapentan, diethyloxidan

Alt efter den faglige sammenhæng eller personlig smag kan brugeren altså vælge det ene eller det andet navn; en vigtig egenskab ved dem alle er imid-

lertid, at de er *entydige*, dvs. at navnet svarer til kun én kemisk forbindelse. (Jf. 1.5).

I en lang række situationer foretager IUPAC dog et klart valg. Fx foretrækkes nummereringen 1,2,4-trimethylbenzen frem for 1,3,4-trimethylbenzen, og navnet 2-hydroxybenzoesyre foretrækkes frem for 2-carboxyphenol, selv om begge navne er entydige i begge tilfælde. I øvrigt er benzoesyre (for benzencarboxylsyre) og phenol (for benzenol) igen eksempler på hævdvundne navne, som IUPAC tillader brugt som stamnavne, selv om de ikke er systematiske.

IUPAC benytter sig af en række udtryksformer, når det skal tilkendes gives, at et navn ikke mere er godkendt som systemnavn eller ønskes nedtonet i forhold til andre navne. Visse trivialnavne nævnes slet ikke i [4], men var systemnavne i henhold til [2] (fx propylenglycol, valerianesyre); andre omtales, så det bliver klart, at de er uønskede nu (fx læser man i [4]: »1,2,5-oxadiazole, formerly furazan« og i [3]: »...sulfamide...discouraged, although [its importance] is well established«). Nogle tidligere systematiske eller halvsystematiske navne frarådes nu, enten ved direkte angivelse (fx er benzocycloocten for benzo[8]annulen »no longer encouraged« – og ved benzenthioi står der: »not thiophenol«), ved diskrete fodnoter (det hedder om diazen i [4], at »this compound has also been known as diimide« og om methylenazinsyre,  $\text{CH}_2=\text{N}(\text{O})\text{OH}$ , at navnet *aci*-nitromethan »is not included in these recommendations«) eller ved brug af ordet »traditionally« (fx »N-hydroxyacetamide, traditionally acetohydroxamic acid« og »dimethyldiazene, traditionally azomethane« – i det sidste tilfælde er der dog en udførlig fodnote, hvori azo-navne anerkendes som et »acceptable alternative«).

I en række tilfælde er navne på tidligere stamforbindelser bibeholdt, men kan ikke længere bruges som stamnavne (2.3) – fx fulvalen, mesitylen, alloxan – eller kun i begrænset omfang (fx toluen og styren, der nu kun må bruges i afledninger dannet ved substitution i ringen).

Den overordnede politik hos IUPAC er klart at bruge stedse flere systematiske navne og så vidt muligt forlade misvisende og tvetydige navne, hvor etablerede de end måtte være.

I nærværende bog anvendes imidlertid en mere kategorisk inddeling. Ud fra IUPAC's (evt. IUBMB's) eksplicite eller underforståede holdning til et givet navn er det her klassificeret enten som *IUPAC-navn*, det være sig systematisk eller ej, som *trivialnavn* uden for IUPAC-nomenklaturen, tilkendegivet ved forkortelsen (triv.), eller som *forældet* (og dermed også uden for IUPAC-nomenklaturen – tilkendegivet ved (foræ.)). Af og til har en arbitrær afgørelse måttet træffes.

Man må endelig også gøre sig klart, at der under nomenklaturens stadige udvikling uvægerligt vil opstå inkonsistenser. Et iøjnefaldende eksempel har været, at den nye lokantplacering (som fx i ethan-1,2-diamin) ikke var indført i [3a]; forklaringen ligger i tidsforskellen mellem [3a] og [4], og systemet fra [4] er naturligvis indført konsekvent her i *Kemisk Ordbog* og nu også i [3b]. Navnet trithiocarbonsyre omtales eksplicit som »not recommended« i [3a], men gives som eksempel på en korrekt anvendelse af præfikset 'thio' i [4]. Noget tilsvarende gælder navnene phosphoran, arson, stiboran (se tabel 3).

### 1.3.2. Trivialnavne [9]

Som trivialnavne betegnes de kemiske navne, som ikke indeholder eksplicit information om det pågældende stofs opbygning. Et typisk eksempel er navnet campher, som hverken siger noget om carbonskelettet eller at det drejer sig om en keton, for slet ikke at tale om stereokemien. Mens forholdsvis simple forbindelser i dag gennemgående navngives ved hjælp af den systematiske nomenklatur, dannes der stadigvæk nye trivialnavne for naturstoffer (jf. 3.11) og for forbindelser med meget komplicerede strukturer, hvor systematiske navne ville blive håbløst lange og uhåndterlige. Det understreges igen, jf. diskussionen i 1.3.1, at trivialnavne udmærket kan være *systemnavne*.

Mange trivialnavne refererer til stoffets oprindelse, fx cadaverin,  $ge\ominus$  raniol, indigo, myresyre, papaverin (fra *lat.* papaver, valmue), piperidin (fra *lat.* piper, peber), smørsyre; guanidin, guanin og guanosin (fra guano); urinstof, urinsyre, uracil, uridin, urethan, biuret og triuret (fra urin) – eller til en stofegenskab, fx acrolein (fra *lat.* acer, skarp), azulen (fra *sp.* azul, blå), lattergas osv. Trivialnavnets endelse angiver somme tider den kemiske stofklasse, fx i de ovennævnte syrer eller i navnet citral, men mange gamle trivialnavne ender på 'in' eller 'ol', hvilket blot skal forstås som -stof. Da man senere ønskede at fjerne vildledende sammenfald eller uoverensstemmelser med suffikserne i den systematiske nomenklatur, blev en række af de ældste trivialnavne ændret, således benzol, durol, toluol og xylol til  $be\ominus$  nzen, duren, toluen og xylen; naphthalin til naphthalen; cholesterin,  $glyce\ominus$  rin, sterin og sorbit til cholesterol, glycerol, sterol og sorbitol; furfural til furfural samt pinacolin til pinacolon. Disse konventioner overholdes generelt også ved nydannelse af trivialnavne, dvs. navne med endelsen 'in' er neutrale i forhold til funktionelle grupper, mens endelserne 'an', 'en', 'ol' og 'al' bruges på samme måde som i den systematiske nomenklatur.

I en række tilfælde er trivialnavne så indarbejdet i nomenklaturen, at de opfattes som *systematiske* navne. Eksempler er methan, ethan, propan og butan (hvor suffikset i forvejen var identisk med det tilsvarende systematiske suffiks for stofklassen). Også veletablerede »ikke-tilpassede« trivialnavne som anilin findes i denne kategori.

Samtlige grundstofnavne op til atomnummer 111 (roentgenium) er i princippet trivialnavne, som anvendes som systemnavne. Grundstofferne kan også tildeles helsystematiske navne, netop baseret på atomnummeret (se 2.2).

Da trivialnavnene i stor udstrækning blev dannet ad hoc, viser de i mange tilfælde noget om de pågældende stoffers opdagelseshistorie, ikke mindst når det drejer sig om isomerer. Navnet xylen (af græsk *ξύλον*, træ) blev fx møntet på den isomerblanding af dimethylbenzener, som bl.a. fås ved destillation af træ, og først efter dens adskillelse præciseredes de enkelte isomerers navne som *o*-xylen, *m*-xylen og *p*-xylen. Af trimethylbenzenerne, som findes i stenkulstjæredestillater, var hemimelliten (1,2,3-trimethylbenzen), mesitylen (1,3,5-trimethylbenzen) og pseudocumen (1,2,4-trimethylbenzen; cumen er det isomere isopropylbenzen) allerede kendt som rene isomerer, således at de fik uafhængige navne.

Tetramethylbenzenerne fik navnene prehniten (1,2,3,4-isomeren), isoduren (1,2,3,5-isomeren) og duren (1,2,4,5-isomeren). Pentamethylbenzen blev først fremstillet efter den systematiske nomenklatur's indførelse og nåede derfor ikke at få et trivialnavn, og det samme gælder for hexamethylbenzen.

Isomererne 2-, 3- og 4-methylpyridin fik trivialnavnene  $\alpha$ -picolin,  $\beta$ -picolin og  $\gamma$ -picolin, og dimethylpyridinerne døbtes  $\alpha,\beta$ -lutidin (2,3-isomeren),  $\alpha,\gamma$ -lutidin (2,4-isomeren),  $\alpha,\beta'$ -lutidin (2,5-isomeren),  $\alpha,\alpha'$ -lutidin (2,6-isomeren),  $\beta,\gamma$ -lutidin (3,4-isomeren) og  $\beta,\beta'$ -lutidin (3,5-isomeren). (For den moderne nummerering af pyridinringen, se tabel 6). Her indeholdt navnene altså straks mere information om strukturen end ved methylbenzenerne. Collidin er fællesnavnet for alle pyridinderivater med molekylformlen  $C_8H_{11}N$ , dvs. trimethylpyridinerne, ethylmethylpyridinerne, propylpyridinerne og isopropylpyridinerne.

Bemærk, at der altså ikke var taget højde for mulig substitution i position 1 (som fx i pyridin-1-oxid), men på den anden side fremhævede man analogien af positionerne 2 og 6 samt 3 og 5.

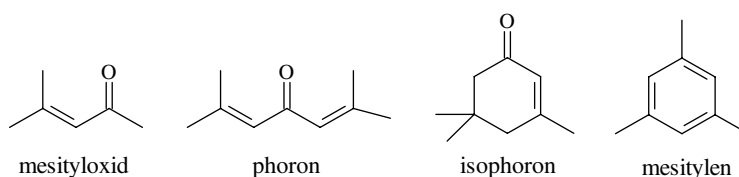
Atomnummereringen i større ringsystemer var opdagerens privilegium og fulgte derfor ikke overordnede principper.

Et relik af gamle nummereringer findes i den systematiske nomenklatur's nummerering af de otte perifere carbonatomer i naphthalen fra 1 til 8

og »hjælpenummereringen« af de resterende to carbonatomer som 4a og 8a (se tabel 5).

Et udbredt princip i trivialnomenklaturen er navngivning af nye forbindelser som isomerer af kendte sådanne; dertil benyttes præfikser som 'iso', 'allo', 'neo' og 'pseudo'. Ud over at isomerien konstateres, udtrykker trivialnavnet ikke noget om strukturen, fx i navne som isopentan og neopentan (isomere med pentan), alloocimen (isomer med ocimen) og pseudocumen (isomer med cumen). På den anden side er pelletierin ( $C_8H_{15}NO$ ) og pseudopelletierin ( $C_9H_{15}NO$ ) ikke isomere; som så tit i trivialnomenklaturen er systematikken langt fra helstøbt. Også præfikserne ' $\alpha$ ', ' $\beta$ ' osv. har været i brug til øremærkning af isomere forbindelser fx ved  $\alpha$ - og  $\beta$ -glucose, men de har derudover været anvendt til medlemmerne af stoffamilier, fx  $\alpha$ -,  $\beta$ - og  $\gamma$ -globulin osv. Endelig har de græske bogstaver været brugt som lokanter (2.7.3).

Stoffamilien mesityloxid (4-methylpent-3-en-2-on), phoron (2,6-dimethylhepta-2,5-dien-4-on), isophoron (3,5,5-trimethylcyclohex-2-en-1-on) og mesitylen (1,3,5-trimethylbenzen) har det til fælles, at det drejer sig om kondensationsprodukter af acetone. Navnet mesityl stod for prop-1-en



n-2-yl ( $CH_2=C(CH_3)-$ ; se andre navne i tabel 8), og acetone blev dengang, hvor forskellen mellem empirisk formel og molekylformel endnu ikke var helt krystallklar, opfattet som mesitylhydroxid og umiddelbart beslægtet med mesityloxid. Mesitylen (jf. ethyl – ethylen) svarer så i moderne sprogbrug til propyn, dvs. stoffet mesitylen er opkaldt efter sin empiriske formel  $(C_3H_4)_n$  uden hensyn til størrelsen af  $n$ , nemlig 3.

*Stereoisomerer* kan have helt ubeslægtede trivialnavne på grund af forskellige opdagelseshistorier, fx parrene angelicasyre/tiglinsyre og fumaroyre/maleinsyre; der kan være et klassisk trivialnavn for den naturlige og et kunstnavn for den unaturlige eller sjældnere isomer, fx oliesyre/elaidinsyre (græsk *ελαιον* (elaion), olivenolie), eller de skelnes ved et systematisk præfiks som i (*E*)- og (*Z*)-kanelisyre (tidligere kanelisyre hhv. allokanelisyre). Selv spejlbilledisomerer kunne få helt forskellige navne, og i tilfældet vin

syre kom den racemiske blanding til at hedde druesyre. Mere komplicerede stereokemiske forhold kan udtrykkes ad hoc, som fx ved stereoisomererne *cis*-, *epi*-, *allo*-, *myo*-, *muco*-, *neo*-, *chiro*- og *scyllo*-inositol (se [5, p. 151]).

Endnu en måde at trivialnavngive isomerer på er dannelsen af anagrammer, fx lyxose (ud fra xylose) og itaconsyre (ud fra aconitsyre).

Med præfikserne 'nor', 'homo' og 'seco' kan man i trivialnavne vise, at der i forhold til stamforbindelsen er fjernet et carbonatom (1.3.7), tilføjet et carbonatom (1.3.6.6), respektive brudt en binding (1.3.6.6), alt sammen under fjernelse eller tilføjelse af et passende antal hydrogenatomer. Således dannes ud fra naturstofnavnet borneol navnet på stamforbindelsen bornan (tabel 5) og derfra igen navne som norbornen og norbornadien. Disse sidste er nu forældede, jf. 1.3.7. Med cystein som udgangspunkt kan man tilsvarende danne navnet homocystein (tabel 16) og fra stamforbindelsen cholan (afledt af naturstoffer som kolesterol og cholsyre, se tabel 5) navne som 1,2-secocholan, 2,3-secocholan osv.

Nogle af de ældste uorganiske trivialnavne er dannet på grundlag af den empiriske formel uden hensyn til molekylformlen, således svovlmonochlorid for  $S_2Cl_2$ , dvs.  $(SCl)_n$  uden hensyn til størrelsen af  $n$ .

Et kapitel for sig er navne, som overfladisk set virker systematiske, men som reelt forbyder sig mod systematikens grundregler og dermed bliver til trivialnavne. Et ældre navn for chlor(trichlormethyl)sulfan ( $CCl_3SCl$ ) er perchlormethylmercaptan, dvs. methylmercaptan (altså methanthiol), hvori samtlige hydrogenatomer er erstattet med chlor. Der er her ikke taget hensyn til, at en forbindelse uden den funktionelle gruppe – SH ikke længere er en mercaptan (thiol i moderne sprogbrug) og derfor er dette navn også af mange fejlagtigt blevet opfattet som trichlormethanthiol ( $CCl_3SH$ ), dvs. methanthiol med det størst mulige antal chloresubstituentter. Akronymet DDT har sin oprindelse i det ligeledes forkerte navn dichlor-diphenyltrichlorethan for  $(4-ClC_6H_4)_2CHCCl_3$ , som rettelig hedder 1,1,1-trichlor-2,2-bis(4-chlorphenyl)ethan.

Visse trivialnavne er afledt af kemikeres eller institutioners navne, enten direkte, fx Chichibabins carbonhydrid, aldrin (efter personnavnet Alder), pelletierin (efter personnavnet Pelletier), buckminsterfulleren (efter personnavnet Buckminster Fuller) og warfarin (efter initialerne i Wisconsin Alumni Research Foundation + endelsen i navnet af stamforbindelsen cumarin), eller indirekte, fx dieldrin (efter Diels-Alder-reaktionen).



### 1.3.3. Nugældende IUPAC-vejledninger og beslægtede dokumenter

Disse er anført i litteraturlisten [2-7]. Den nyeste *røde bog* [3b] og de *blå bøger* [2,4] dækker hhv. den grundlæggende uorganisk-kemiske og den grundlæggende organisk-kemiske nomenklatur. Specielle områder er dækket i [5-7]. Situationen for den organiske nomenklatur er lidt indviklet, fordi [4] ikke er tænkt som en fuldstændig erstatning for [2]. For områder, der ikke er behandlet i 'guiden', gælder den gamle bog i princippet stadigvæk. Endvidere er nomenklaturen i [5-7] af naturlige årsager ikke rettet til efter de mange anvisninger i [4].

### 1.3.4. Oversættelse af IUPAC-nomenklatur til dansk

IUPAC's vejledninger er skrevet på engelsk. IUPAC har ikke angivet eksplicite forskrifter for, hvorledes nomenklaturen skal tillempes til andre sprog, blot opfordret til, at »ånden« i IUPAC's anbefalinger bibeholdes. Takket være den multinationale sammensætning af IUPAC-kommissionerne har man dog ind imellem overvejet mulige problemer ved oversættelse til andre sprog, og de engelsksprogede vejledninger indeholder enkelte ændringer af sådanne overvejelser i fodnoterne.

Da en fuldstændig oversættelse af IUPAC's vejledninger ligger uden for denne bogs rammer, kan læserne have brug for at kunne gå til de originale IUPAC-publikationer, konstruere det navn, de efterspørger, på engelsk og så oversætte det. Med henblik på denne situation skal vi her angive nogle generelle retningslinier for oversættelse af engelske IUPAC-navne til dansk.

- (1) I endelserne 'ane', 'ate', 'ene', 'ide', 'ime', 'ine', 'ite', 'ole', 'one', 'yde', 'yne' slettes det afsluttende 'e' (fx i decane, cyclohexane, cinnamaldehyde oxime, phenothiazine, butyne, pyrrole, dimethyl sulfone, phosphate). Som undtagelse beholder acetone sit 'e' (jf. dog det systematiske navne propanon for samme forbindelse).
- (2) I præfikserne bromo, chloro, cyano, fluoro, iodo, isocyano i *substitutiv nomenklatur* slettes det afsluttende 'o', jf. tabel 10. *NB*: Dette gælder ikke for tilsvarende præfikser i *koordinationsnomenklatur*, jf. tabel 12. Andre præfikser beholder deres 'o', fx acetamido, cyanato, hydrazono, isothiocyano. Hvis et 'o' er indsat af udtalemæssige årsager på

- engelsk og ikke behøves på dansk, udelades det, fx engelsk hexanohydrazide, dansk hexanhydrazid.
- (3) Syrenavne kræver i en række tilfælde en specifik oversættelse, fx butyric acid = smørsyre, nitric acid = salpetersyre. Systematiske carboxylsyrenavne oversættes som eksemplificeret her: pentanoic acid = pentansyre, hexandioic acid = hexandisyre, hex-3-enoic acid = hex-3-ensyre, cyclohex-3-ene-1-carboxylic acid = cyclohex-3-en-1-carboxylsyre.
  - (4) Engelske radikofunktionelle navne (1.3.6.4) er i to eller flere ord; på dansk skal de skrives som ét ord, fx acetone oxime = acetoneoxim, dimethyl ether = dimethylether, dimethyl sulfoxide = dimethylsulfoxid.
  - (5) Engelske binære navne (1.3.6.3) er i to eller flere ord; de tilsvarende danske skrives ligeledes som ét ord, dvs. ethyl hydrogen phthalate bliver til ethylhydrogenphthalat, arsenic trichloride til arsenrichlorid osv.
  - (6) Saltnavne dannet på engelsk ud fra et fritstående syrenavn skal på dansk skrives som ét ord, fx bliver sodium salt of 4-[(2-hydroxy-1-naphthyl)diazenyl]benzenesulfonic acid til 4-[(2-hydroxy-1-naphthyl)diazenyl]benzensulfonsyrenatriumsalt.

### 1.3.5. Oversigt over konstruktionsmåder for IUPAC-navne

Konstruktionen af et IUPAC-systemnavn foregår i almindelighed ved at den foreliggende forbindelse ansues som dannet ud fra en *stamforbindelse* og *substituentgrupper* – eller ud fra flere dele, som i sig selv kan tildeles IUPAC-systemnavne ved en tilsvarende betragtning – ved en enten *additiv*, *subtraktiv*, *substitutiv* eller *multiplikativ* proces. IUPAC-navnet for forbindelsen dannes da ud fra enkeltdelernes IUPAC-navne ved passende modifikation af disse i henhold til reglerne for den pågældende proces, kombineret med en passende anvendelse af *tegnætning*, *hjælpstavelser* (*affikser*, dvs. *præfikser*, *infikser* eller *suffikser*) og *lokanter* (tal eller bogstaver til positionsangivelse).

Der kan altså være tale om at anvende en eller flere navnekonstruktionsmåder successivt, indtil man er nået ned til et niveau, hvor man kan blive færdig ved brug af stamnavne, som direkte er anført hos IUPAC.

Et IUPAC-navn kan alt i alt ende med at bestå af følgende dele:

*stamnavn(e)*

*støkiometriske deskriptorer*

*tegnsetning (fx parenteser, bindestreger, lange bindestreger)*

*additive, subtraktive, substitutive og multiplikative affikser*

*numeriske (eller andre) lokanter*

*stereokemiske deskriptorer*

Vi gennemgår i det følgende de vigtigste konstruktionsmåder for navne svarende til de fire typer af processer omtalt ovenfor. En oversigt over tegnsetning, affikser, lokanter og deskriptorer findes i 2.7.

### 1.3.6. Additive navnekonstruktioner

#### 1.3.6.1. Egentlig additionsnomenklatur

Denne navnetype er den simplest opbyggede af alle. Delnavne stilles sammen uden ændring, blot adskilt af en *lang bindestreg*, og det derved fremkomne additionsnavn efterfølges af en numerisk deskriptor, der angiver forbindelsens støkiometri. Delnavnene skal blot i sig selv være IUPAC-navne.

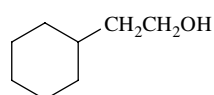
$8\text{H}_2\text{S}\cdot 46\text{H}_2\text{O}$	hydrogensulfid—vand (8/46)
$2\text{Na}_2\text{CO}_3\cdot 3\text{H}_2\text{O}_2$	natriumcarbonat—hydrogenperoxid (2/3)
$\text{CO}\cdot\text{BH}_3$	carbonmonoxid—boran (1/1)
$\text{BF}_3\cdot\text{H}_2\text{O}$	bortrifluorid—vand (1/1)

Delnavnene ordnes

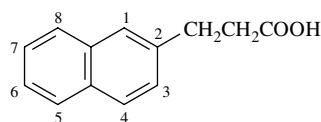
- (1) efter stigende antal, dog således at vand kommer til sidst
- (2) i øvrigt alfabetisk efter delnavnene.

#### 1.3.6.2. Konjunktiv nomenklatur

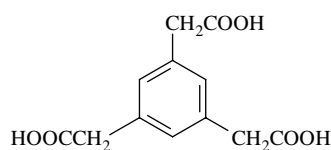
Denne type er næsten lige så enkel som den foregående: delnavne på indgående komponenter sammenstilles uden forandring til ét ord. Til gengæld angives antallet af komponenter, når det er større end 1, med *multiplikative præfikser* (tabel 2), som vist i følgende eksempler:



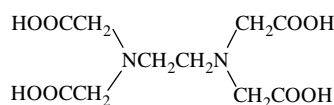
cyclohexanethanol



naphthalen-2-propionsyre



benzen-1,3,5-triiddikesyre

ethylendiamintetraeddikesyre  
*N,N,N',N'*-ethan-1,2-diamintetraeddikesyre

Konjunktiv nomenklatur anvendes næsten udelukkende i den situation, hvor en kæde med en endestillet karakteristisk gruppe (tidligere *funktionel gruppe*) er bundet til et ringsystem i den anden ende af kæden, som i de tre første navne ovenfor. Fælles for alle eksemplerne er, at et hydrogenatom fjernes fra hver komponent, når de to komponenter bindes sammen.

Gamle danske navne som »svovlkulstof«, »svovljern« og »cyankali-um« kunne *formelt* opfattes som en art konjunktiv nomenklatur. Disse navne er nu forældede.

### 1.3.6.3. Binær nomenklatur (»saltnomenklatur«)

Det drejer sig her om den type navne, der traditionelt bruges om simple salte, estere og organiske halogenider, pseudohalogenider og chalcogenider, altså fx

NaCl	natriumchlorid
SbF <sub>5</sub>	antimonpentafluorid
MgCl(OH)	magnesiumchloridhydroxid
MgNH <sub>4</sub> PO <sub>4</sub>	ammoniummagnesiumphosphat
CH <sub>3</sub> COOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	ethylacetat
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COCl	benzoylchlorid
(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> S	diethylsulfid
C <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	tricarbondioxid

Fælles for disse navne er, at de består af to typer delnavne, som repræsenterer henholdsvis de formelt »kationiske« eller »elektropositive« og de formelt »anioniske« eller »elektronegative« komponenter.

Delnavnene for de formelt kationiske komponenter er navne på kationer (3.5.2) eller på organiske substituentgrupper (2.4, 2.5), og de forandres ikke, når de indgår i det binære navn. De formelt anioniske komponenter har altid anionnavne (3.5.1).

De to delnavnetyper sammenstilles på dansk til ét langt ord, idet man først skriver de formelt kationiske i alfabetisk rækkefølge, derpå de formelt anioniske, ligeledes i alfabetisk rækkefølge. Bemærk i eksemplerne ovenfor, at denne regel kan bevirke, at rækkefølgen i navnet adskiller sig fra rækkefølgen i formlen. Antal angives ved multiplikative præfikser (tabel 2), som ikke influerer på alfabetiseringen. Forbindelsens støkiometri kan alternativt være impliceret af oxidationstrinsangivelse under anvendelse af *Stock-tal*, romertal i parentes umiddelbart efter grundstofnavnet (eller den modificerede form deraf), eller ladningstal:

jern(II)chlorid = jern(2+)chlorid = jerndichlorid,  $\text{FeCl}_2$

chrom(III)sulfat = dichromtris(sulfat),  $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$

natriumtetraoxidoferrat(2-) =  $\text{Na}_2\text{FeO}_4$

Oxidationstrinsangivelsen giver dog ikke altid fuldstændig information: med kviksølv(I)chlorid menes  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$ , altså dikviksølv(2+)dichlorid; arsen(III)oxid er  $\text{As}_4\text{O}_6$ , altså tetraarsenhexaoxid.

I det hele taget giver binær nomenklatur principielt ingen strukturel information, med mindre de indgående delnavne bærer sådan information.

#### 1.3.6.4. Nomenklatur baseret på substituentgruppenavne og navne på karakteristiske grupper (*radikofunktionel nomenklatur*)

IUPAC kalder de her resulterende navne for *functional class names* i [4]. Den vigtigste karakteristiske gruppe (tidligere *funktionelle gruppe*, jf. tabel 11) anføres til sidst i navnet, og før dét anføres den eller de substituentgrupper (tidligere *radikaler*, jf. 2.4), der er bundet til den karakteristiske gruppe, i alfabetisk rækkefølge. Eksempler med de karakteristiske grupper –OH (alkohol), –O– (ether) og –(C=O)– (keton):

$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}$	benzylalkohol
$\text{CH}_3\text{OC}_6\text{H}_5$	methylphenylether
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$	diethylether

$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{COCH}_3$  isobutylmethylketon

### 1.3.6.5. Koordinationsnomenklatur

Koordinationsnomenklatur har sit historiske udspring i komplekskemien. Princippet er dog meget generelt og anvendeligt langt ud over gruppen af klassiske metalkomplekser. Ideen er, at ét eller flere atomer i en struktur opfattes som *centralatomer* og de øvrige komponenter af strukturen som *ligander*, dvs. komponenter, der binder til et enkelt centralatom eller som danner bro (tilkendegivet ved symbolet 'μ') mellem to eller flere sådanne.

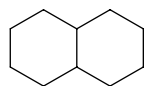
Liganderne tilkendes i navnet ved særlige præfikser (2.6), kombineret med relevante multiplikative præfikser (tabel 2), mens centralatomerne bibeholder deres grundstofnavne i neutrale og positivt ladede forbindelser og modificeres med endelsen 'at' i henhold til tabel 1 i negativt ladede forbindelser. Den samlede forbindelses ladning eller centralatomernes oxidationstrin kan angives, ligesom der kan tilføjes yderligere dele til navnet, fx stereokemiske deskriptorer. I eksemplerne nedenfor er ligandpræfikserne understreget.

$\text{SbF}_5$	penta <u>fluorido</u> antimon
$\text{PF}(\text{O})[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]_2$	<u>fluoridooxidodi</u> (propan-2-olato)phosphor
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_3(\text{NO}_2)_3]$	triammin <u>trinitro</u> cobalt(III)
$\text{S}_2\text{O}_8^{2-} = [\text{O}_3\text{SOOSO}_3]^{2-}$	μ- <u>peroxido</u> -bis( <u>trioxido</u> sulfat)(2-)

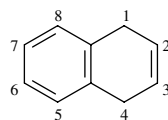
Strukturel navngivning af koordinationsforbindelser behandles i 3.9.

### 1.3.6.6. Additioner tilkendes i navnet ved særlige præfikser og suffikser

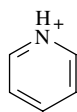
Visse affikser anvendes til at tilkende addition til en udgangsstruktur af atomer eller grupper: 'hydro' betegner fx addition af et hydrogenatom, 'ium' anvendes ved dannelse af en kation ved hydronisering, 'homo' betegner tilføjelse af et carbonatom (med tilhørende hydrogenatomer):



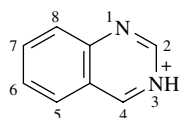
decahydronaphthalen



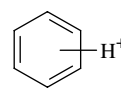
1,4-dihydronaphthalen



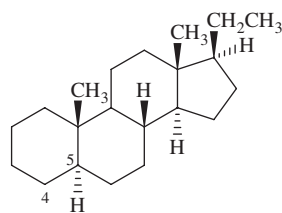
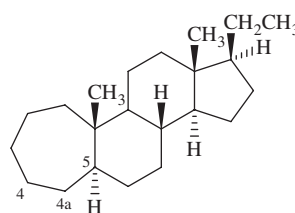
pyridinium



quinazolin-3-ium



benzenium

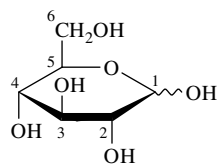
5 $\alpha$ -pregnan4a-homo-5 $\alpha$ -pregnan

(Vedr. nummereringen af pregnansystemet, se 3.11.5.1.)

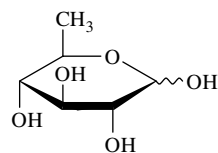
Addition af hydrogenatomer i forbindelse med brydning af en binding i en ring tilkendes med præfikset 'seco', jf. illustrationen allerførst i dette kapitel.

### 1.3.7. Subtraktive navnekonstruktioner

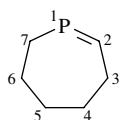
Visse affikser anvendes til at tilkendegive subtraktion fra en udgangsstruktur af atomer eller grupper: 'deoxy' betegner fjernelse af et oxygenatom, 'dehydro' betegner fjernelse af et hydrogenatom, 'nor' betegner fjernelse af en CH<sub>2</sub>-gruppe fra en sidekæde eller en ring:



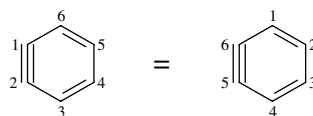
D-glucopyranose



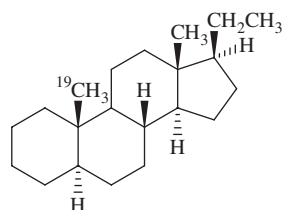
6-deoxy-D-glucopyranose



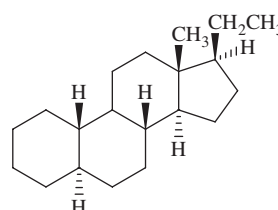
1,2-didehydrophospepan



1,2-didehydrobenzen cyclohexa-1,3-dien-5-yn

4,5,6,7-tetrahydro-3*H*-phospepin

5α-pregnan



19-nor-5α-pregnan

Erstatning af en methylgruppe med H kan også tilkendes ved præfikset 'demethyl' (fx i demethylmorphin). Visse navne indeholdende præfikset 'nor' har været baseret på en anden tankegang, fx betød norbornan forbindelsen, hvori *alle* bornans methylgrupper var fjernet (se strukturen af bornan i tabel 5). For at undgå forvirring har man nu forladt disse navne.

Andre subtraktive affikser er 'anhydro' og 'des', jf. tabel 13, 'en' og 'yn' (2.3.1.2) og til en vis grad 'id' og 'yl' (3.5.1, 3.5.3 og eksempler i tabellerne 8 og 17).

### 1.3.8. Substitutive navnekonstruktioner (udskiftningskonstruktioner)

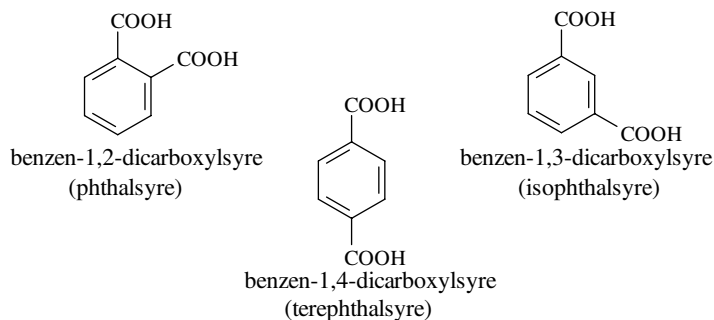
#### 1.3.8.1. Substitution af hydrogen i stamhydrider angivet ved præfikser og suffikser

I stamhydrider (2.3) kan et eller flere hydrogenatomer formelt erstattes af substituentgrupper. Til angivelse af sådanne substitutioner anvendes præ-



fikser eller suffikser, eventuelt sammen med numeriske eller andre lokanter til positionsangivelse (2.7.3). Lokanterne skrives *umiddelbart foran* præfikset/suffikset.

$C_6H_5NHNHC_6H_5$	1,2-diphenyldiazan (eller 1,2-diphenylhydrazin, jf. tabel 3)
$SbF_5$	pentafluor- $\lambda^5$ -stiban
$CH_3CHBrCH_3$	2-brompropan
$CH_3CH_2OCH_2CH_3$	ethoxyethan eller diethyloxidan
$CH_3CHOHCH_3$	propan-2-ol
$CH_3CH_2CHO$	propanal
$CH_3COCH_3$	propanon



For carboxylsyreer, amider, hydrazider, nitriler mv. findes et alternativt system, hvorefter udskiftning af en endestillet *methyl*gruppe tilkendegives ved brug af de alternative suffikser 'syre', 'amid', 'nitril' osv. (jf. 3.3.2.8):

$HOOCCH_2CH_2COOH$	butandisyre
$CH_3CH_2CONH_2$	propanamid
$CH_3CH_2CN$	propannitril

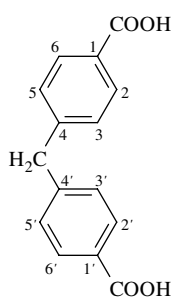
Er der flere substitutioner med forskellige substituentgrupper, hvoraf nogle kan angives ved suffiks (jf. tabel 11), angives den vigtigste sådanne gruppe, bestemt ud fra prioriteringsrækkefølgen i tabel 11, med *suffiks*, øvrige substituentgrupper med *præfiks*. Samtlige præfikser i navnet ordnes under alle omstændigheder alfabetisk uden hensyntagen til deres antal, og derpå tilføjes multiplikative præfikser til angivelse af deres antal, samt lokanter, som fx i

$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CHOHCOOH}$  2-hydroxy-4,4-dimethylpentansyre  
 $[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_2]_3[[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}]\text{CH}_2]\text{N}^+$  tris(decyl)tridecylammonium

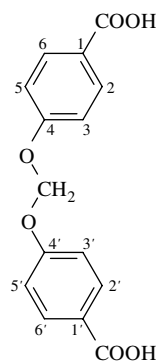
Numeriske præfikser i substituentgruppenavne regnes som en del af disse ved alfabetiseringen, men ikke kursiverede præfikser som *sec*- og *tert*-. Har man to ens substituentgruppenavne med forskellig nummerering, kommer navnet med den laveste nummerering først, altså 1-methylhexyl før 2- $\infty$ -methylhexyl.

### 1.3.8.2. Navne på (symmetriske) forbindelser med polyvalente substituentgrupper

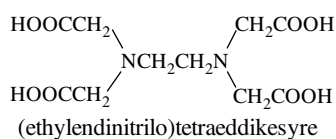
Når en polyvalent substituentgruppe med hver fri valens er substitueret ind i et eksemplar af samme forbindelse, kan et symmetrisk navn konstrueres:



4,4'-methylendibenzoesyre



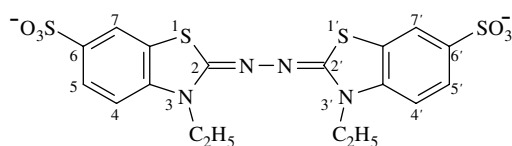
4,4'-(methylendioxy)dibenzoesyre



Bemærk de sammensatte substituentgruppenavne methylendioxy og ethylendinitrilo, jf. 2.5.2.

Navne af den viste slags er ofte mere overskuelige end regelrette substitutive navne i henhold til 1.3.8.1; fx ville (ethylenedinitrilo)tetraeddikesyre substitutivt ud fra længste carbonkæde (jf. 2.8.2) hedde [[2-[bis(carboxymethyl)amino]ethyl](carboxymethyl)amino]eddikesyre.

I den færdige forbindelse skelnes de gentagne delstrukturer på den polyvalente substituentgruppe ved lokanter med mærker, som benyttes ved videre afledninger, så man fx får 2,3'-dibrom-4,4'-methyldibenzoesyre og 2,2',2''-trichlornitrotrieddikesyre,  $N(\text{CHClCOOH})_3$ . Se også navnene for cystin i tabel 15 og for ABTS<sup>®</sup> nedenfor.



3,3'-diethyl-2,2'-azinobis(2,3-dihydro-1,3-benzothiazol-6-sulfonat)  
ABTS<sup>®</sup>

Hvis den polyvalente substituentgruppe er substitueret ind i forskellige positioner, får man navne som 2,3'-(methyldioxy)dibenzoesyre.

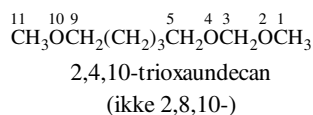
### 1.3.8.3. Substitution af carbonatomer i stamcarbonhydrider

#### (»a-nomenklatur«)

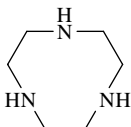
Den mest generelle metode til dannelse af navne på hydrider med flere slags skeletatomer er *udskiftningsnomenklatur* (»a-nomenklatur«). Principet er, at forbindelsen opfattes som det tilsvarende homonukleare carbonhydrid, hvori et antal carbonatomer er udskiftet med heteroatomer (atomerne optræder naturligvis med det relevante antal bundne hydrogenatomer i forhold til deres valens, altså  $\text{CH}_2$  udskiftes med  $\text{SiH}_2$ ,  $\text{NH}$  og  $\text{O}$  osv. og  $\text{CH}$  med  $\text{SiH}$ ,  $\text{N}$  osv.). Heteroatomerne tilkendes ved det præfiks, der er anført i sidste kolonne i tabel 1. Normalt anvendes denne navngivningsmetode *ikke* ved udskiftning af endestillede carbonatomer i kæder.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$	3-oxapentan (andre navne mulige)
$\text{CH}_3\text{SSCH}_3$	2,3-dithiabutan (andre navne mulige)
$\text{CH}_3\text{NHCH}_2\text{NH}_2$	(methylamino)methanamin
$\text{HOOCCH}(\text{NH}_2)\text{CH}_2\text{SSCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$	2,7-diamino-4,5-dithiooctandisyre, cystin

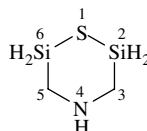
De indførte heteroatomer nummereres lavest muligt.



silacyclopentan



1,4,7-triazacyclononan



1-thia-4-aza-2,6-disilacyclohexan

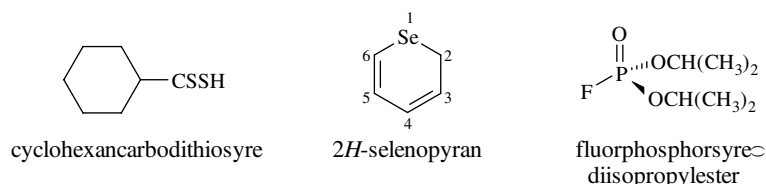
Bemærk i det sidste eksempel, at hvis der er flere heteroatomer, nævnes de tidligere, jo længere mod højre de pågældende grundstoffer står i periodesystemet. Man prioriterer efter rækkefølgen  $\text{O} > \text{S} > \text{Se} > \text{Te} > \text{N} > \text{P} > \text{As} > \text{Sb} > \text{Bi} > \text{Si} > \text{Ge} > \text{Sn} > \text{Pb} > \text{B}$  og giver højest prioriterede grundstofatomer laveste numre. Først efter hensyntagen til denne regel nummererer man færdig, så heteroatomgruppen som helhed får det laveste nummersæt (som præciseret i 2.8.2).

En variant af den her beskrevne nomenklatur er *Hantzsch-Widman-nomenklaturen* for heterocykliske ringsystemer (2.3.4.2).

#### 1.3.8.4. Substitution af $-\text{OH}$ , $=\text{O}$ , $-\text{O}-$

For visse forbindelsestyper har man traditionelt kunnet navngive analoger fremkommet ved udskiftning af hydroxygrupper og oxogrupper med grupper som fx  $-\text{SH}$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{CN}$  og  $=\text{S}$  ved hjælp af særlige præfikser og infixer. Man får navne som

amidosvovlsyre	$\text{H}_2\text{NSO}_3\text{H}$
phenylphosphonchloridsyre	$\text{C}_6\text{H}_5\text{P}(\text{O})\text{Cl}(\text{OH})$
cyanphosphorsyre, phosphorcyanidsyre	$\text{O}=\text{P}(\text{CN})(\text{OH})_2$
pentanimidsyre	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{C}(=\text{NH})\text{OH}$
acetoneethyltellurohemiketal, 2-(ethyltellanyl)propan-2-tellurool	$\text{CH}_3\text{C}(\text{TeH})(\text{TeC}_2\text{H}_5)\text{CH}_3$
thiourinstof	$\text{H}_2\text{NC}(=\text{S})\text{NH}_2$



De vigtigste af de præfikser/infikser, der i givet fald skal anvendes, er følgende:

<i>Præfiks</i>	<i>Infiks</i>	<i>Indført gruppe/udskiftet gruppe</i>
amido	amid(o)	-NH <sub>2</sub> /-OH
azido	azid(o)	-N <sub>3</sub> /-OH
brom	bromid(o)	-Br/-OH
chlor	chlorid(o)	-Cl/-OH
cyanato	cyanatid(o)	-OCN/-OH
cyan	cyanid(o)	-CN/-OH
fluor	fluorid(o)	-F/-OH
hydrazido	hydrazid(o)	-NHNH <sub>2</sub> /-OH
imido	imid(o)	=NH/=O
iod	iodid(o)	-I/-OH
isocyanato	isocyanatid(o)	-NCO/-OH
isocyan	isocyanid(o)	-NC/-OH
peroxy	peroxo	-O-O-/-O-
seleno	seleno	-SeH/-OH, =Se/=O, -Se-/-O-
telluro	telluro	-TeH/-OH, =Te/=O, -Te-/-O-
thio	thio	-SH/-OH, =S/=O, -S-/-O-

Anvendelser af denne type udskiftningsnomenklatur er senere vist i forbindelse med nogle af stamhydriderne (pyran, chroman, isochroman, chromen, isochromen og xanthen i tabel 6; morpholin i tabel 7), ved chalcogenoanaloger til carboxylsyrer (3.3.2.7) og beslægtede forbindelser (3.3.2.8) samt under behandlingen af forbindelser afledt af uorganiske oxosyrer (3.4.3) og af carbohydrater (3.11.2.4).

De mange o'er i parentes ovenfor refererer til situationer, hvor det efterfølgende ord gør det mest mundret med en hjælpevokal; eksempelvis kan O=P(CN)[N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>](OH) kaldes phosphorcyano(dimethylamid)syre.

re, mens  $\text{HN}=\text{P}(\text{CN})(\text{OH})_2$  bliver cyanimidophosphorsyre eller phosphor- $\ominus$  cyanidimidsyre.

### 1.3.9. Multiplikative navnekonstruktioner

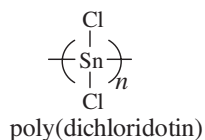
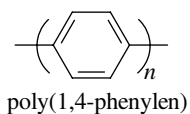
Mange af de allerede omtalte navne indeholder multiplikative konstruktioner for så vidt som substituentgruppenavne, ligandbetegnelser mv. er forsynet med multiplikative præfikser. I dette afsnit skal vi imidlertid se på nogle konstruktioner beregnet for situationer, hvor et antal *ens* strukturelle enheder sammensættes. For oligomernavnene vedkommende i 1.3.9.1 samt for proceduren omtalt i 1.3.9.2 er der tale om generelle metoder til konstruktion af navne på stamforbindelser.

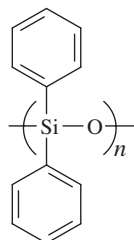
#### 1.3.9.1. Oligo- og polymernomenklatur

Grundprincippet her er, at navnet på en repeterende enhed i en kæde eller en ring nævnes med et specifikt multiplikativt præfiks (fra første søjle i tabel 2), når enhedernes antal  $n$  er kendt, subsidiært med præfikset 'oligo' ved *oligomere* systemer, hvor  $n$  ikke ønskes specificeret, og præfikset 'poly' ved *polymere* systemer (grænsen mellem oligomer og polymer er ikke strengt defineret; polymer anvendes efter skøn ved et »stort« antal  $n$ , fx ved  $n > 10$ ).

Yderligere forstavelser med strukturel information såsom 'cyclo-' (ring), hhv. 'catena-' (kæde), samt 'triangulo-', 'tetrahedro-' mv. kan tilføjes (se tabel 13).

$\text{S}_8$	<i>cyclo</i> -octasvovl
$\text{P}_4$	<i>tetrahedro</i> -tetraphosphor
$\text{-(S)}_n$	<i>catena</i> -poly[svovl]





catena-poly[diphenylsilicium- $\mu$ -oxido]  
poly(diphenylsiloxan)

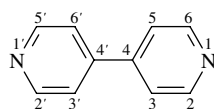
Bemærk de to navne, hvor den repeterende enhed er navngivet ved koordinationsnomenklatur, i det sidste af disse med omvendt placering af broli-gandbetegnelsen. I det hele taget er problemet ved polymernomenklatur at definere den repeterende enhed og navngive den. Mere herom i 3.10.

Det andet navn for siliciumforbindelsen er af en type, der også anvendes for ringe, hvor den er ganske analog, fx cyclotetrasiloxan (jf. 2.3.4), samt for åbne oligomerkæder, hvor den sidste repeterende enhed kun er »halv«, fx tetrasiloxan (jf. 2.3.3).

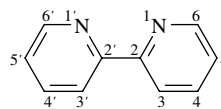
De viste polymernavne er *strukturelle* navne. Man kan også navngive polymerer ud fra de monomerer, der kan tænkes brugt til at fremstille dem (3.10.2).

### 1.3.9.2. Sammensætning af identiske ringsystemer

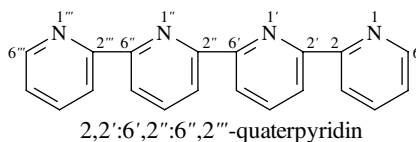
Identiske ringforbindelser kan sammensættes til systemer, hvis navne dannes af navnet på den indgående enhed, et multiplikativt præfiks fra rækken bi, ter, quater, quinque osv. (tabel 2) samt lokanter, der beskriver det præcise bindingsmønster.



4,4'-bipyridin

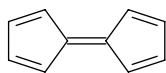


2,2'-bipyridin

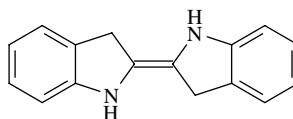


Usymmetrisk sammensætning gives analogt, fx 2,3'-bipyridin.

En variant af denne nomenklaturtype er sammensætning af identiske substituentgrupper baseret på et ringsystem, fx



1,1'-bi(cyclopenta-2,4-dien-1-yliden)



(*E*)-2,2'-bi(indolin-2-yliden)

## 1.4. CAS-nomenklatur

Den nomenklatur, *Chemical Abstracts* bruger [10], er i al væsentlighed i overensstemmelse med IUPAC-reglerne, men bærer præg af, at dens hovedformål er anvendelse i opbygningen af registre. CAS-navne vil man, så længe man bevæger sig inden for systemet, aldrig se skrevet ud, men kun se i den inverterede form (med stamforbindelsen først), som registrene bygger på. Da CAS-navne ifølge sagens natur kun findes på engelsk, falder de egentlig uden for nærværende bogs emne og vil kun blive diskuteret ganske kort.

Specielle træk, som brugere af *Chemical Abstracts* vil lægge mærke til, er den konsekvente brug af »overflødige« lokanter (2.7.3.2) og af navne for symmetriske forbindelser opbygget efter metoden beskrevet i 1.3.8.2.

Således hedder diethylether hos CAS 1,1'-oxybisethane, mens den analoge, men ikke symmetriske ethylmethylether hedder methoxyethane. Mere avancerede eksempler er 1,1'-[(1-chloroethylidene)bis(oxy)]bisethane for  $\text{CH}_3\text{CCl}(\text{OCH}=\text{CH}_2)_2$  og 1,2-ethanediylbis[ethyl disulfide] for  $\text{C}_2\text{H}_5\text{SSCH}_2\text{CH}_2\text{SSC}_2\text{H}_5$ .

Den nye IUPAC-regel, som placerer lokanterne umiddelbart før den funktion, de hører til, fx i but-2-en, praktiseres endnu ikke i *Chemical Abstracts*, hvor det altså stadigvæk hedder 2-butene.



CAS betjener sig også i vid udstrækning af »a-nomenklatur« (1.3.8.3). Sml. fx navnet for mecarbam i *Kemiske Ord* med CAS-navnet, som er ethyl 6-ethoxy-2-methyl-3-oxo-7-oxa-5-thia-2-aza-6-phosphanonoate 6-sulfide.

Brug af trivialnavne og halvsystematiske navne er mindre udbredt inden for CAS-systemet end hos IUPAC, fx bruges 2-methylpropyl, ikke isobutyl, og benzenamin, ikke anilin.

En aldehydgruppe, hvis carbonatom ikke er del af stamforbindelsen, betegnes ifølge CAS med 'carboxaldehyde', mens IUPAC anbefaler 'carbaldehyde'.

Vedrørende uorganiske forbindelser kan man notere sig CAS-navnene phosphine for  $\text{PH}_3$ , arsine for  $\text{AsH}_3$ , phosphorane for  $\text{PH}_5$  og arsorane for  $\text{AsH}_5$ . Jf. noter til tabel 3.

Svovlforbindelser kan være opfattet som afledt af oxygenforbindelser, således i navnet thioperoxydiphosphoric tetrafluoride for  $\text{F}_2\text{P}(\text{S})\text{SSP}(\text{S})\text{F}_2$ .

En række CAS-navne er underbestemte og står så til gengæld i fast forbindelse med molekylformlen, fx 'aluminum chloride ( $\text{AlCl}_3$ )', 'beryllium chloride ( $\text{BeCl}_2$ )' og 'sulfur fluoride ( $\text{S}_7\text{F}_{42}$ )'.

Afslutningsvis bør nævnes, at CAS ud over navne opererer med et *nummersystem*. Hver eneste rene kemiske forbindelse (og derudover racemater, polymerer og andre blandinger) har et entydigt bestemt nummer. CAS-numrene er dog ikke informationsbærende.

## 1.5. Andre nomenklatorsystemer

De nomenklatorsystemer, der omtales i nærværende bog, er ikke de eneste eksisterende. IUPAC's nomenklaturdivision, Beilstein-instituttet mfl. arbejder til stadighed med problemet om én-éntydighed, altså med dette at finde et nomenklatorsystem, hvori der ikke alene til et givet navn svarer (højst) én kemisk forbindelse, men hvor der også til hver forbindelse svarer et og kun ét navn. I forbindelse med dette arbejde er fremkommet forslag om meget generelle systemer, bl.a. nodalnomenklatur [11].

I 2005 kunne IUPAC annoncere udviklingen af en ny type kode, INChI (IUPAC-NIST Chemical Identifier), baseret på en offentligt tilgængelig computeralgoritme. En INChI er en streng af symboler, og INChI'er spås en vigtig rolle i kommunikation mellem databaser; men de er ikke en erstatning for konventionelle kemiske navne. Flere detaljer må søges på IUPAC's hjemmeside ([www.iupac.org](http://www.iupac.org)).

## Litteratur

- [1] IUPAC, *Nomenclature of Inorganic Chemistry (Definitive Rules 1970)*, 2nd Ed., Butterworths, London, 1971.
- [2] IUPAC, *Nomenclature of Organic Chemistry (1979 Edition, Sections A, B, C, D, E, F and H)*, Pergamon Press, Oxford, 1979.
- [3] a. IUPAC, *Nomenclature of Inorganic Chemistry (Recommendations 1990)*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.  
Nu afløst af  
b. *Nomenclature of Inorganic Chemistry (IUPAC Recommendations 2005)*, RSC Publishing, Cambridge 2005.
- [4] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993.
- [5] IUBMB, *Biochemical Nomenclature and Related Documents – A Companion*, 2nd Edition, Portland Press, London, 1992.
- [6] IUBMB, *Enzyme Nomenclature (Recommendations 1992)*, Academic Press, San Diego, CA, 1992.
- [7] IUPAC, *Compendium of Macromolecular Nomenclature*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991.
- [8] H. A. Smith, Jr., The Centennial of Systematic Organic Nomenclature, *J. Chem. Ed.* **69** (1992) 863-865.
- [9] FIZ Chemie, Berlin, *Dictionary of Common Names – Trivialnamen-Handbuch*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1993.
- [10] *Chemical Abstracts Index Guide*, Chemical Abstracts Service, Columbus, OH, 1994, Appendix IV, s. 102-272. Ny udgave kom i 2002.
- [11] N. Lozac'h, A. L. Goodson, Nodal nomenclature II – Specific for Parent Hydrides, Free Radicals, Ions, and Substituents, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.* **23** (1984) 33-46.

Referencerne i [10] indeholder endvidere en omfattende fortegnelse over IUPAC/IUB/IUBMB's, CAS's og American Chemical Society's nomenklaturpublikationer samt oversigtsartikler, historiske afhandlinger mv.