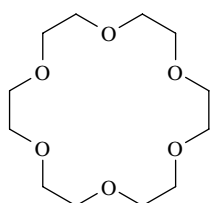
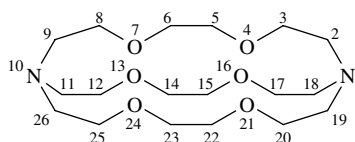


2. IUPAC-nomenklaturens grundkomponenter og grundlæggende regler



1,4,7,10,13,16-hexaoxacyclooctadecan
18-krone-6



4,7,13,16,21,24-hexaoxa-1,10-diazabicyclo[8.8.8]hexacosan
cryptand 222

2.1. Indledning

Hvor det foregående kapitel introducerede de forskellige konstruktionsmåder for systematiske IUPAC-navne, drejer det sig i nærværende kapitel om de grundbestanddele, som navnene konstrueres ud fra – stamnavne, substituentgruppe- og ligandbetegnelser samt diverse hjælpestavelser og tegnsætning.

2.2. Grundstofnavnene

Tabel 1 giver navnene på de første 112 grundstoffer samt nogle afledninger af disse navne.

Da *Kemisk Ordbog* udkom første gang i 1996, var det stadig ikke klart, hvordan diskussionen om navnene på grundstofferne med atomnummer 104-109, som havde stået på længe, ville ende. Endelig i 1997 kunne Council, IUPAC's øverste besluttende organ, til hvis møder alle medlemslande sender repræsentanter hvert andet år, vedtage de navne, vi kender nu. For-

løbet har været skildret i fagpressen, herunder i artikler i *Dansk Kemi* [1]. Problemet var bl.a., at man ikke havde nedfældet klare og internationalt accepterede regler for, hvornår og hvordan nyopdagede grundstoffer skulle navngives. Det er i mellemtiden sket med [9], og grundstofferne med atomnummer 110 og 111, hvis eksistens er blevet fastslået i de senere år, er blevet navngivet under behørig iagttagelse af den i [9] beskrevne procedure, som bl.a. involverer nedsættelse af en ekspertgruppe med repræsentation fra både IUPAC og IUPAP (*International Union of Pure and Applied Physics*) til vurdering af de forsøg, hvori fremstilling af nye grundstoffer påberåbes.

IUPAC foreslog i [2] et system til navngivning af grundstoffer, som mildt sagt har givet anledning til blandede reaktioner i kemikersamfundet, fordi formålet med det er blevet misforstået. Systemet er baseret på følgende grundstavelser for talordene fra 0 til 9:

| | | |
|---------|----------|---------|
| 0 = nil | 4 = quad | 8 = oct |
| 1 = un | 5 = pent | 9 = enn |
| 2 = bi | 6 = hex | |
| 3 = tri | 7 = sept | |

Disse stavelser kombineres i henhold til atomnummeret, og navnet forsynes til sidst med endelsen '(i)um', dvs. grundstof nummer 112 hedder i dette system 'ununbium', og grundstof nummer 120 hedder 'unbinilium'. De tilsvarende symboler er Uub og Ubn.

Meningen med disse navne var at have et navn og et symbol (undtagelsesvis altså med tre bogstaver), som kunne bruges i den fase, hvor opdagelsen var gjort, men diskussionen om, hvem der opdagede/fremstillede grundstoffet først, og hvad det skulle hedde, ikke var tilendebragt. I det øjeblik, hvor et egentligt grundstofnavn tildeles, er det systematiske navn automatisk forældet og bør ikke bruges mere. Af samme grund er systematiske navne og tilhørende symboler for grundstofferne til og med roentgenium (nummer 111) klassificeret som 'forældede' i de tilfælde, hvor de er medtaget i *Kemiske Ord*.

Hvis man er interesseret i yderligere oplysninger om de seneste opdagelser af grundstoffer, anbefales det at konsultere IUPAC's hjemmeside (www.iupac.org) under *Chemical Elements*.

Grundstofnavnene, de tabellerede afledninger og andre afledninger er vigtige elementer i koordinationsnomenklatur (1.3.6.5), nomenklatur for

udskiftning af carbonatomer i stamcarbonhydrider (1.3.8.3) og i binær nomenklatur (1.3.6.3).

2.3. Stamforbindelser og stamnavne

Andre vigtige byggesten i IUPAC-nomenklaturen er navne på *stamforbindelser*. Begrebet stamforbindelse (hos IUPAC *parent structure*) er ikke begrundet i nogen dybere teoretisk klassifikation, men snarere fastlagt ved udnævnelse af bestemte forbindelser eller klasser af forbindelser til stamforbindelser.

Eksempler på forbindelser, alle umiddelbart vil tænke på som stamforbindelser, er simple carbonhydrider som methan, ethan, propan osv., benzol, naphthalen, cyclohexan, måske buckminsterfulleren, fosphan (phosphin) og sulfan (hydrogensulfid); men sådan som IUPAC-nomenklaturen er opbygget, er forbindelser som penta-1,3-dien, benzoesyre, urinstof, 1,4,7-triazonan og ferrocen også stamforbindelser.

Andre forbindelser kan under revisioner af IUPAC-reglerne været blevet deklassificeret, så de ikke længere regnes for stamforbindelser, fx acetophenon. Atter andre er stadig stamforbindelser, men deres tidligere navn er forladt, fx valeriansyre (stadig stamforbindelse, kan nu kun hedde pentansyre).

Det eller de navne på en stamforbindelse, som kan anvendes som byggesten ved navngivning af derivater af den, kaldes *stamnavnet* (-navnene). Det afgørende ved stamnavne er, at de kan (må) underkastes de fundamentale nomenklaturoperationer fra *substitutiv nomenklatur*: tilføjelse af substituentgruppeaffikser (1.3.8.1) og dannelse af substituentgruppenavne (2.4). Bemærk, at stamforbindelser undertiden, hvis de har et accepteret ikke-systematisk navn, nummereres anderledes i forbindelse med dette end når de navngives systematisk [se 2*H*-azirin (tabel 6) og purin (tabel 7)]; eller der kan være to lige gode systematiske navne, som fører til forskellig nummerering (se [9]annulen, 2.3.2, og 2,3-dihydrofuran, 2.3.4).

En særlig vigtig type stamforbindelser er *stamhydriderne*, og en væsentlig del af nærværende kapitel handler om dannelse af stamhydridnavne (2.3).

En række forbindelser er stamforbindelser i en snævrere forstand, fx kan oxosyrer underkastes visse substitutionsoperationer (3.4.3).

For en bestemt klasse af hydrider, nemlig *borhydriderne* (*boranerne*), og derivater af disse som *carbaboraner* (carboraner), er bindingsforholde-

ne så specielle, at man har måttet udvikle en særlig nomenklatur. Den vil det føre for vidt at komme ind på her, og vi må, på nær for de allersimpleste forbindelser i kategorien, henviser til [2, kap. I-11].

2.3.1. Navne på homonukleare acykliske stamhydrider (uforgrenede kæder)

2.3.1.1. De simpleste stamhydrider

Tabel 3 indeholder anbefalede navne for de simpleste stamhydrider af grundstoffer andre end carbon, inklusive de laveste borhydrider (jf. bemærkning i slutningen af forrige afsnit). Den systematik, der er tilstræbt, bortset fra nogle få etablerede trivialnavne som ammoniak, kunne for så vidt overføres til carbonhydriderne, således at man fik navne som

CH_4 , carban

C_2H_6 , dicarban

C_2H_4 , dicarben

C_2H_2 , dicarbyn

$\text{HC}\equiv\text{CCH}$, tricarbyn

$\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{CH}_2$, tetracarba-1,3-dien

osv., men her har vi valgt, som IUPAC, at bevare de traditionelle systemnavne, hvoraf de første – methan til og med butan – ikke er systematiske. De resterende er systematiske, idet de er afledt af talordene (samme stammer som de multiplikative præfikser i første kolonne af tabel 2), men indeholder ikke en rod, der viser tilbage til grundstoffet carbon.

Navne på de laveste carbonhydrider er anført i tabel 4.

2.3.1.2. Angivelse af umættetheder

I tabel 2 og 3 har vi set eksempler på angivelse af umættetheder, dvs. dobbelt- og tripelbindinger, i stamhydrider. Principperne herfor er generelle og kan for de vigtigste tilfælde opsummeres således:

Nummering af strukturen vælges først og fremmest

[a] så umættethederne som helhed får lavest nummerering (jf. 2.8.2);

dernæst, hvis dette ikke fastlægger nummereringen,

[b] således at dobbeltbindinger får lavest nummerering.

I det færdige navn for forbindelsen udskiftes endelsen i navnet for det tilsvarende mættede hydrid med 'en' (i tilfælde af at der er dobbeltbindinger), om nødvendigt forsynet med multiplikativt præfiks (tabel 2, første spalte) og lokant(er), i givet fald efterfulgt af 'yn', også med eventuelle lokanter og multiplikativt præfiks. Hvis den samlede umættethedsendelse starter med konsonant, er det kun det afsluttende 'n' i det oprindelige navn, der skiftes ud, ellers er det 'an'.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$, pent-2-en (ikke pent-3-en, regel [a])

$\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{CHCH}_3$, penta-1,3-dien (ikke penta-2,4-dien, regel [a])

$\text{CH}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$, pent-1-en-4-yn (ikke pent-4-en-1-yn, regel [b])

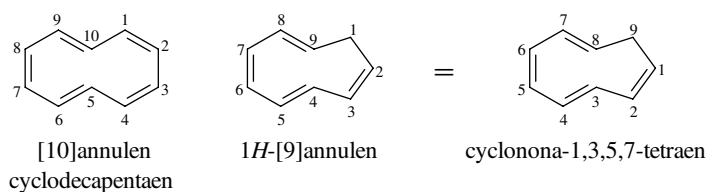
$\text{NH}_2\text{NHN}=\text{NNH}_2$, pentaaz-2-en

I alle disse tilfælde anvendes én lokant for hver multipel binding; bindingen går så fra atomet med det pågældende nummer til atomet med nummer 1 højere. I tilfælde, hvor bindingen forbinder atomer, der ikke har nabonumre, angives også det højst nummererede i en rund parentes, jf. lokanten 10(19) i navnet for ergocalciferol (se formel allerførst i kap. 1).

2.3.2. Navne på homonukleare monocykliske stamhydrider uden sidekæder

Cykliske hydrider navngives som de acykliske hydrider, vi omtalte i 2.3.1, blot sættes forstavelsen *cyclo* forrest i navnet som en integrerende del af dette (sml. *cyclo-*, tabel 13). Man får altså navne som cyclooctasilan, cyclootetraazadien, cyclooctan, cyclooctatetraen (de to sidste foretrækkes stadig frem for cyclooctacarban, hhv. cyclooctacaratetraen). Systemer med umættetheder nummereres ligesom ved de acykliske forbindelser (2.3.1) således, at dobbeltbindinger får lavest mulige numre. Dette kan ses illustreret i tabel 5, hvor de laveste cykliske stamcarbonhydrider er angivet med systematiske navne.

Særlige navne er indført for de *manmade* monocykliske carbonhydrider med ringstørrelse > 6 , dvs. dem med det maksimale antal ikke-kumulerede dobbeltbindinger. Ringens størrelse anføres i kantet parentes, efterfulgt af ordet annulen. For ringe med ulige antal atomer er der netop én CH_2 -gruppe; den kan angives med indiceret hydrogen (jf. 2.7.3.1). Da indiceret hydrogen skal nummereres lavest (2.8.3), får man på denne måde for de ulige ringe en anden nummerering end ved brug af den ligeledes tilladte, ovenfor indførte navngivning (cycloheptatrien osv.).



2.3.3. Navne på heteronukleare acykliske stamhydrider (uforgrenede kæder)

Vi har i 1.3.8.3 stiftet bekendtskab med udskiftningsnomenklaturen som en generel metodik til dannelse af navne på stamhydrider med heteroatomer.

Kæder med alle heteroatomer nabostillet, specielt kæder med kun ét heteroatom, navngives oftest substitutivt (1.3.8.1) ud fra det tilsvarende stamhydrid (tabel 2) eller radikofunktionelt (1.3.6.4), men udskiftningsnavne er i princippet altid en mulighed ('a-navnene' nedenfor), selv om IUPAC-reglerne går i retning af at begrænse brugen af dem:

| | |
|--|--|
| CH_3OCH_3 | dimethyloxidan, dimethylether, oxapropan |
| $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_3$ | ethylpropylamin, ethylpropylazan, 3-azahexan |
| $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SSCH}_3$ | ethylmethyldisulfan, ethylmethyldisulfid, 2,3-dithiapentan |
| $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{SiH}_2\text{SiH}_2\text{CH}_3$ | 1,3-dimethyltrisilan |
| $(\text{CH}_3)_2\text{AsAs}(\text{CH}_3)_2$ | tetramethyldiarsan |

For det særlige tilfælde, hvor kæden består af alternerende atomer af to slags, altså kæder af typen ABAB....ABA (hydrogenatomer udeladt), med

B højere prioriteret end A i rækken $O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > C > Si > Ge > Sn > Pb > B$, anvendes navne af typen

multiplikativt præfiks + {A} + {B} + an

hvor {A} betegner grundstofnavnet for A i a-formen (tabel 1, sidste søjle) og {B} tilsvarende. Dobbelte vokaler efter {A} og {B} i det færdige navn slettes, mens en eventuel dobbeltvokal efter det multiplikative præfiks bevares. Umættetheder angives også i disse navne som forklaret i 2.3.1.

| | |
|---------------------------------|---------------------|
| $SiH_3SSiH_2SSiH_2SSiH_2SSiH_3$ | pentasilathian |
| $AsH_2NHAsHNHAsHNHAsH_2$ | tetraarsazan |
| $CH_3N=CHN=CH_2$ | tricarbaza-1,3-dien |

Hvis et atom optræder med et andet bindingstal n end

4 for C, Si, Ge, Sn, Pb
 3 for B, N, P, As, Sb, Bi
 2 for O, S, Se, Te

udstyres navnet med en deskriptor λ^n sammen med de relevante lokanter, altså eksempelvis

$H_3P=NPH_2=NPH_2=NPH_4$, $1\lambda^5,3\lambda^5,5\lambda^5,7\lambda^5$ -tetrachosphaza-1,3,5-trien

Sml. med

$HP=NP=NP=NPH$, tetrachosphaza-1,3,5-trien

(Bemærk den udbredte brug af navne som tetrachosphazen for den første af disse forbindelser).

Nogle heteronukleare acykliske stamhydrider bestående af uforgrenede kæder har specielle navne, såsom

$H_2C=C=O$, keten (jf. 3.3.2.5)
 $HN=C=NH$, carbodiimid (jf. tabel 14D)
 $HN=NCH=NNH_2$, formazan (jf. tabel 14D)

2.3.4. Navne på heteronukleare monocykliske stamhydrider

2.3.4.1. Udskiftningsnomenklatur

Grundlæggende kan den tidligere præsenterede udskiftningsnomenklatur («a-nomenklaturen») anvendes til samtlige af overskriften dækkede stamhydrider. Se nogle eksempler i 1.3.8.3. Man har dog traditionelt i heterocykkelkemi anvendt Hantzsch-Widman-navne (2.3.4.2). Disse er til gengæld ikke udviklet eller anbefalet af IUPAC for meget store ringe som fx krone-ethere, hvor man stadig må ty til udskiftningsnomenklatur, jf. venstre figur allerførst i kap. 2.

Vi giver i en række eksempler nedenfor såvel H-W-navn som udskiftningsnavn til illustration af begge metoder.

2.3.4.2. Hantzsch-Widman-navngivning for heteromonocykler

Disse navne udmærker sig ved generelt at være mere kompakte end udskiftningsnavnene omtalt i 2.3.4.1.

Princippet i H-W-nomenklaturen er, at forbindelsen opfattes som afledt af en carbocyklisk ring, hvis størrelse angives ved et suffiks, ved udskiftning af visse atomer med heteroatomer, hvis art og antal så specificeres ved passende præfikser. Ringsuffikset indeholder også oplysning om mættetheden af systemet.

Præfikserne for heteroatomerne er ligesom i udskiftningsnomenklaturen de i tabel 1, sidste kolonne, anførte. Med ringsuffikserne forholder det sig lidt mere komplekst. De fremgår af følgende tabel:

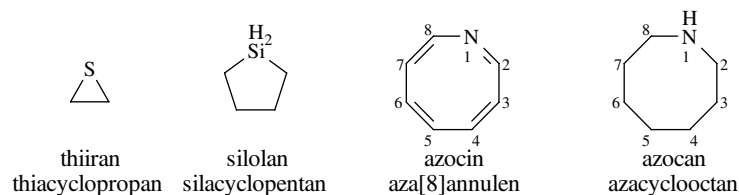
| Ringstørrelse | H-W-suffiks, fuldt mættet ring | H-W-suffiks, mættet ring |
|---------------|--------------------------------|--------------------------|
| 3 | iran (iridin) | iren (irin) |
| 4 | etan (etidin) | et |
| 5 | olan (olidin) | ol |
| 6 | an (inan) | in (inin) |
| 7 | epan | epin |
| 8 | ocan | ocin |
| 9 | onan | onin |
| 10 | ecan | ecin |

Noter: Endelserne 'iridin', 'etidin', 'olidin' foretrækkes for nitrogenholdige ringsystemer af de respektive størrelser. Endelsen 'irin' er et alternativ

til 'iren' for ringe, der som heteroatomer kun indeholder nitrogen. For seksleddede ringe bestemmes ringsuffikset af det i navnet sidst nævnte heteroatom (se eksempler nedenfor). I fuldt mættede seksringe bruges 'an', hvis dette heteroatom er O, S, Se eller Te, og 'inan', hvis det er N, P, As, Sb, Si, Ge, Sn, Pb eller B. I mættede seksringe (mættede, se 2.3.2) bruges 'in', hvis det sidst nævnte heteroatom er O, S, Se, Te, N, Si, Ge, Sn eller Pb og 'inin', hvis det er P, As, Sb eller B. Navnene azin for pyridin og oxin for pyran må ikke bruges, da de har, hhv. har haft andre betydninger (se Kemiske Ord).

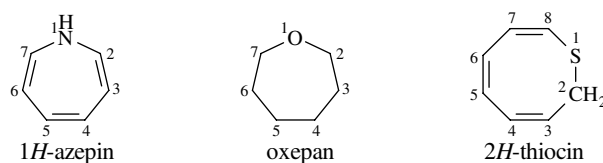
Som det ses, kan talordene, som vi kender fra tabel 2, anes i ringsuffikserne, bortset fra dem for 5- og 6-leddede ringe. Man anvender ikke H-W-systemet for ringe større end 10-leddede.

Fremgangsmåden ved konstruktion af H-W-navne illustreres nu ved nogle eksempler:

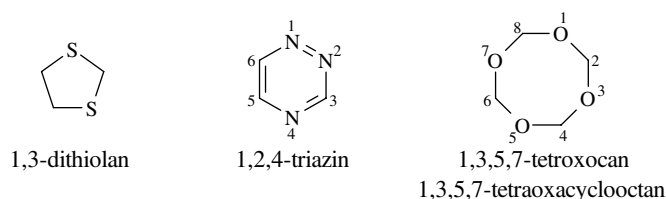


I hvert tilfælde er øverst anført H-W-navnet, nederst udskiftingsnavnet. Bemærk, at alle præfiksslutvokaler i H-W-navnet elimineres ved sammenstød med en startvokal i den efterfølgende del af navnet, altså thiiran snarere end thairan, silolan snarere end silaolan, azocin snarere end azaocin.

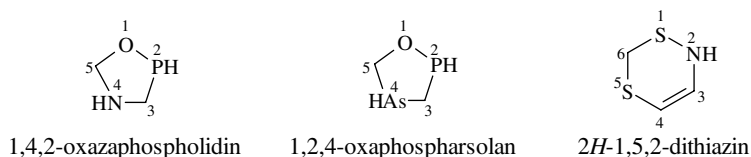
I monoheterocykler starter nummereringen ved heteroatomet.



Bemærk anvendelse af indiceret hydrogen (jf. 2.7.3.1) til fuldstændig specificifikation af konstitutionen. Ved flere ens heteroatomer anvendes det relevante multiplikative præfiks fra tabel 2, og nummereringen starter ved et heteroatom og således, at heteroatomsættet som helhed nummereres lavest muligt (se note i 2.8.2), eksempelvis:

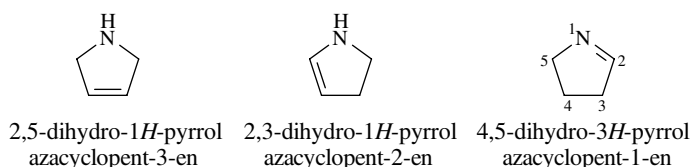
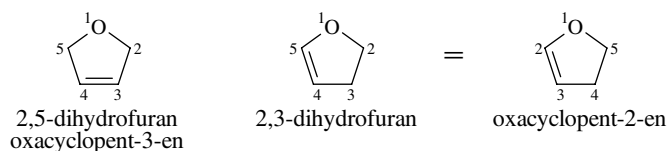


Når der er adskillige slags heteroatomer, gives nummer 1 til det grundstof, der kommer først i rækken O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B. Derefter nummereres, så heteroatomsættet som helhed får lavest mulig nummerering (jf. igen note i 2.8.2).



Yderligere eksempler på Hantzsch-Widman-navne kan ses i tabellerne 6 og 7, der giver IUPAC-godkendte ikke-systematiske navne for cykliske stamhydrider med ét eller flere heteroatomer (pyrrol, thiophen, imidazol osv.).

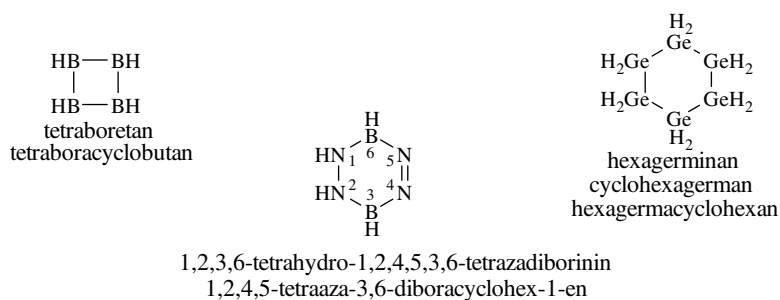
Bemærk, at tidligere accepterede navne for umættede forbindelser med et antal dobbeltbindinger mindre end hos de tilsvarende mættede systemer (2.3.2) nu er forladt (det gælder azetin, pyrrolin, oxazolin mfl.). Disse forbindelser må nu navngives *enten* ud fra den tilsvarende mættede forbindelse ved præfikset 'dehydro' (så pyrrolin bliver til didehydropyrrolidin), jf. 1.3.7, *eller* ud fra den tilsvarende mættede forbindelse ved præfikset 'hydro' (så pyrrolin bliver til dihydropyrrol), jf. 1.3.6.6; IUPAC synes at foretrække den sidste mulighed. Udskiftningsnomenklatur er stadig også en mulighed.



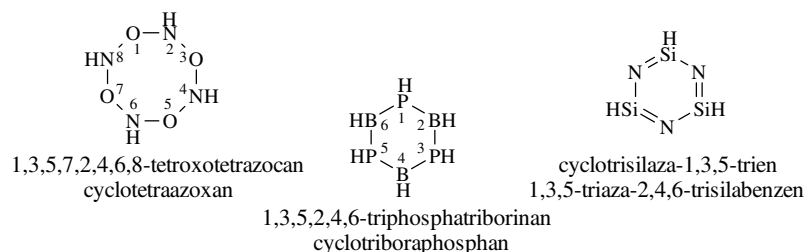
Se også tetrahydrophosphepin-eksemplet i 1.3.7. Vedrørende nummerering af ringatomerne, se 2.8.3.

En konsekvens af H-W-definitionerne er, at forbindelser med det samme navn, men forskellige substitutionsmønstre, kan have forskelligt antal dobbeltbindinger, fx 1,4-dioxin (tabel 7, to dobbeltbindinger) og 1,3-dioxin (= 1,3-dioxacyclohex-4-en, altså kun én dobbeltbinding).

Systemer med lutter ikke-carbonatomer kan fremdeles navngives ved både H-W-nomenklatur og »a-nomenklatur«, og en generalisation af nomenklaturen for homonukleare acykliske hydrider (2.3.1) er også mulig (til navne som cyclopentasilan, cyclohexagerman osv.):



Endelig er der ved ringe af gentagne enheder af typen $\text{—AH}_m\text{BH}_n\text{—}$ en oplagt generalisation af nomenklaturen for tilsvarende kædesystemer præsenteret i 2.3.3:



Navnene borazin, boroxin og borthiin er tilladte ikke-systematiske navne for hhv. cyclotriborazan, -triboroxan og -triborathian (se tabel 7).

2.3.5. Navne på oligocykliske stamhydrider

Godkendte ikke-systematiske stamnavne for homo- og heterooligocykliske stamhydrider er givet i tabellerne 5, 6 og 7 med den nummerering af skeletatomerne, der er vedtaget til brug *sammen med disse navne*. I en række tilfælde er alternative systematiske navne også givet, eller strukturer, der kun har sådanne, er vist for at illustrere bestemte navnetyper.

Mange brugere vil kunne klare sig et langt stykke vej alene med disse stamhydridnavne fra tabellerne, men vi vil alligevel kort omtale nogle generelle metoder til dannelse af yderligere navne for oligocykliske stamhydrider.

2.3.5.1. Navne på sammensætninger af identiske ringsystemer

Princippet i denne nomenklatur er forklaret i 1.3.9.2. Særlige navne gælder for sammensætning af benzenringe, hvor stammen 'phenyl' ligger til grund (se biphenyl og 1,1':4',1''-terphenyl i tabel 5).

I de sammensatte systemer bevares nummereringerne i de enkelte ringe, blot adskilt ved mærker på numrene, fx

1,1'-dimethyl-4,4'-bipyridin-1,1'-dium (se 1.3.9.2 og tabel i kap. 5, paraquat)

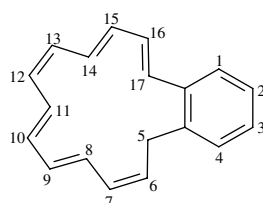
[1,1'-binaphthalen]-3,3',4,4'-tetramin (se 3.3.2.3)

(IUPAC er ikke konsekvent mht. anvendelsen af kantet parentes i sådanne afledte navne).

2.3.5.2. Navne på mancude annelerede ringsystemer (fusionsnavne)

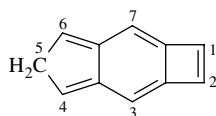
Når to ringe deler netop én kant, kaldes de *annelerede*. Der findes en nomenklaturtype, en slags substitutiv nomenklatur, for navngivning af *mancude* (se 2.3.2) *annelerede ringsystemer* ud fra de indgående ringe, og den kan udvides til også at dække annelering af flere end to ringe. Reglerne for denne nomenklatur foreskriver, hvorledes det centrale ringsystem, hhv. den eller de substituerende sideringe vælges; hvordan disse komponenter repræsenteres i det færdige navn; og hvordan den færdige struktur nummereres. Reglerne er temmelig omfattende [8], så vi indskrænker os her til et par eksempler til demonstration af, hvorledes sådanne navne afkodes.

I det simpleste tilfælde skal blot angives, at ét ringsystem er anneleret til det andet; det sker ved endelsen 'o', således at benzen bliver til benzo, naphthalen til naphtho osv. (men anthracen til anthra). Er det ene system benzen og det andet [15]annulen (jf. 2.3.2), fås (bemærk nummereringen):

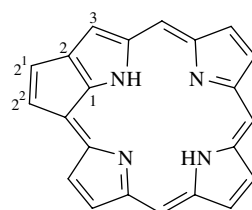


5H-benzo[15]annulen

I stedet for '[4]annulo', '[5]annulo' osv. bruges 'cyclobuta', 'cyclopenta' osv. som vist her:



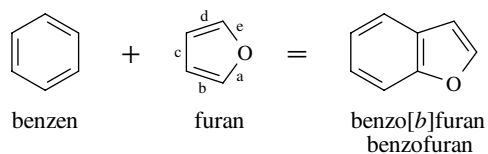
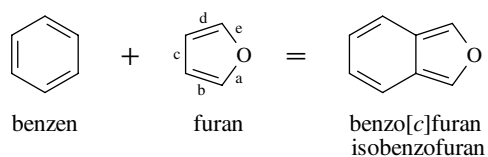
5H-cyclobuta[7]inden



cyclopenta[4a]porphyrin

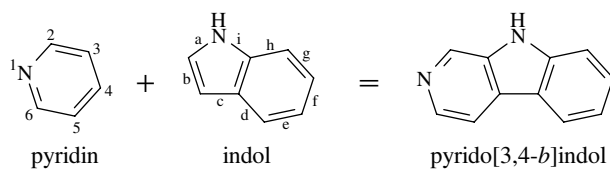
Steroiderne (3.11.5.1) kan afledes af et gennemhydrogeneret cyclopenta[*a*]phenanthrenskelet.

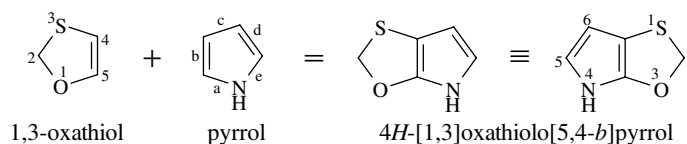
Indeholder en af ringene heteroatomer, bliver der forskel på det annelerede system alt efter hvilke(n) kant(er) heterocyklen deler med sin(e) naboring(e). Med bogstaverne *a*, *b*, *c*... angives, hvilken kant anneleringen er sket på, fx



Navnene benzofuran og isobenzofuran er kortformer, der er godkendt som stamnavne (tabel 6). Nummereringen af disse to stamforbindelser fremgår af nævnte tabel; bemærk, at i annelerede heterocykliske ringsystemer er atom nr. 1 ikke nødvendigvis et heteroatom. Ifølge en særskilt nomenklatur for lige netop benzoannelerede systemer kan benzofuran og isobenzofuran i øvrigt også kaldes hhv. 1-benzofuran og 2-benzofuran.

Er der også heteroatomer i de ringsystemer, der anneleres til det centrale ringssystem, identificeres annelerende kanter i disse ved numeriske lokanter:



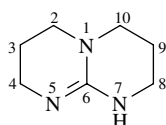


I det sidste eksempel ses, at lokanterne fra delsystemet 1,3-oxathiol følger med over i det færdige navn i kantet parentes. I annelingsdeskriptoren placeres lokanterne, der definerer den deltagende kant fra oxathiolringen, i den rækkefølge, der er fastlagt ved bogstaveringen af pyrrolringen, så man får [5,4-*b*]. Nummereringen af det samlede system har igen intet med nummereringen af delsystemerne at gøre.

Afslutningsvis skal nævnes, at mange annelerede ringsystemer har status som stamforbindelser med stamnavne, der er betydeligt simple end fusionsnavnene ville være; se tabellerne 5, 6 og 7.

2.3.5.3. Oligocykliske ringsystemer ved von Baeyer-nomenklatur

Når to ringe har to eller flere atomer fælles (se fx quinuclidin, tabel 6, der er opbygget af to seksleddede ringe, der har fire fælles atomer), kan systemet navngives som *bicyklisk forbindelse* i henhold til *von Baeyer-nomenklaturen*. Opbygningen specificeres ved at man angiver antallet af atomer i hver bro, idet man gennemløber systemet fra et brohoved (atom, hvor de to ringe mødes) gennem først længste bro, så næstlængste og til sidst korteste bro. Undervejs nummereres atomerne, begyndende med nr. 1 ved brohovedet. Det til quinuclidin svarende mættede carbonhydrid bliver herved bicyclo[2.2.2]octan og quinuclidin dermed 1-azabicyclo[2.2.2]octan. Andre eksempler er den højre struktur i figuren allerførst i kap. 2 og



1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-en

hvoraf det sidste viser, at annelerede ringsystemer (2.3.5.2) også kan navngives ved von Baeyer-nomenklatur. Atter andre eksempler på bicykliske forbindelser, alle fra tabel 5, er

bicyclo[2.2.0]hexa-2,5-dien

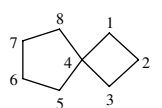
1-isopropyl-4-methylbicyclo[3.1.0]hexan (thujan)
 3,7,7-trimethylbicyclo[4.1.0]heptan (caran)
 2,6,6-trimethylbicyclo[3.1.1]heptan (pinan)
 1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan (bornan)

De sidste fire har status som stamforbindelser (med navnene i parentes som stammavn og nummerering som vist i tabel 5).

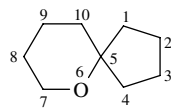
Systemet kan udvides til tricykliske systemer osv.; vi nævner blot som eksempel adamantan (tabel 5), som er tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]decan (super-skripterne tilkendegiver, at der ud over de tre broer mellem carbonatomerne nr. 1 og 5 er en bro indeholdende ét carbonatom mellem atomerne nr. 3 og 7).

2.3.5.4. Navne på spiroforbindelser

Systemer, hvori to ringe har netop ét atom til fælles, kaldes *spiroforbindelser*. Navngivningen i et par enkle systemer illustrerer spironomenklaturen, der kan opfattes som et slags specialtilfælde af von Baeyer-nomenklaturen med kun ét brohoved:



spiro[3.4]octan



6-oxaspiro[4.5]decan

I en anden type spironavne tilkendes i kantet parentes de indgåede ring-systemer, samt hvilke positioner i disse, der besættes af spiroatomet; se fx navnet for fluorescein i *Kemiske Ord*.

2.3.5.5. Komplicerede systemer

Multicykliske carbonhydrider kan blive så komplicerede, at en navngivning enten fører til et uacceptabelt langt navn eller er umulig. Se fx diskussioner af de polyedriske forbindelser dodecahedran og buckminsterfulleren [4]; sidstnævnte har et IUPAC-navn, der fylder 6 linier; *uden lokanter* er det hentriacontacyclohexacontatriacontaen, altså en 60-atomig struktur med 31 ringe og 30 dobbeltbindinger.

2.4. Navne på substituentgrupper afledt af stamhydrider

Se tabel 8 for et udvalg af sådanne. Grundlæggende dannes substituentgruppenavne ud fra stamhydridnavne ved tilføjelse af endelserne 'yl', 'diyl', 'triy' osv. Dobbelbindinger og triplbindinger tilkendes ved i stedet for 'diyl' at bruge 'yliden', hhv. i stedet for 'triy' at bruge 'ylidyn'. Lokanter viser positionen af den eller de frie valenser, fx propan-2-yl. Nogle hydridnavne afkortes: methanyl bliver til methyl, germanyl til germyl osv. For propan, butan osv. anvendes den afkortede form i den specifikke betydning af 1-yl-substituentgruppen, altså butyl betyder butan-1-yl osv.

Substituentgruppenavne dannet ud fra stamhydrider uden karakteristiske grupper kan kun bruges som præfikser.

En del substituentgrupper har godkendte trivialnavne eller halvsystematiske navne, fx oxy (= oxidandiyl), isopropyl (= propan-2-yl), vinyl (= ethenyl).

Bropræfikserne bruges til divalente substituentgrupper, når de forbinder atomer i kæder eller i ringsystemer. Se fx i *Kemiske Ord* navne for ace- og naphthen og acenaphthylen, hvori der er anvendt bropræfikser.

2.5. Andre substituentgruppenavne

2.5.1. Generelt

Ud fra de substituentgrupper, der er direkte afledt af stamhydrider (2.4), kan andre dannes ved substitution, og deres navne kan tilsvarende dannes ved anvendelse af substitutiv nomenklatur: 1-chlorpropan-2-yl for $\text{ClCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)-$, (1-oxoethyl)azanyl eller acetylamino for $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{NH}-$ osv. For en hel række substituentgrupper er alternative navne tilladt, som oftest navne, der er beslægtede med et accepteret trivialnavn for den tilsvarende forbindelse, hvor den frie valens er erstattet med H eller OH, fx met-syl eller methansulfonyl for CH_3SO_2- (helsystematisk ville det være methyldioxo- λ^6 -sulfanyl) og acetamido for $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{NH}-$.

Navne for en række sammensatte substituentgrupper, altsammen præfikser, er givet i tabellerne 9, 10 og 11. For karakteristiske grupper, der kan optræde som hovedfunktion og dermed blive angivet ved suffiks i substitutive navne, kan suffikset endvidere findes i tabel 11.

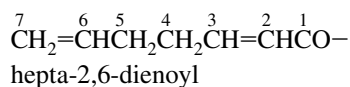
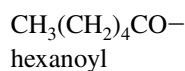
2.5.2. Kæder af substituentgrupper

I 2.5.1 omtalte vi *substitutiv* navngivning af sammensatte substituentgrupper. Navne på substituentgrupper bestående af kæder af substituentgrupper kan alternativt dannes ved direkte sammenstilling af disses navne, fx

| | |
|---|----------------------------------|
| CH_3SO_2- | methylsulfonyl (se også ovenfor) |
| $-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-$ | oxydimethylen |
| $-\text{O}-\text{CH}_2-\text{O}-$ | methylenedioxy |
| $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{N}<$ | decanoyloxyethylennitrilo |

2.5.3. Acylsubstituentgrupper

Acylsubstituentgrupper ($\text{RC}(=\text{O})-$) navngives generelt ved at navnet på stamhydridet svarende til den længste kæde i R-gruppen, som ender med $\text{C}(=\text{O})$ -gruppen, tilføjes endelsen -oyl:

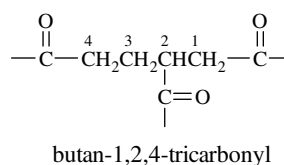
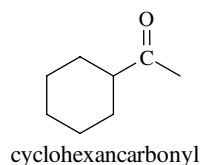


Bemærk, at nummereringen starter ved carbonylgruppen, således at vi får 2,6- i navnet ovenfor, selv om det tilsvarende carbonhydrid hedder hepta-1,5-dien.

Der kan være tale om kæder med en carbonylgruppe i begge ender, hvor endelsen -dioyl så benyttes:



Hvis carbonylgruppen er bundet til en ring, eller hvis der er flere end to carbonylgrupper, navngives ud fra det stamhydrid, carbonylgruppen eller -grupperne er bundet til, ved tilføjelse af endelsen -carbonyl, om fornødent med et multiplikativt præfiks (tabel 2):



2.6. Ligandbetegnelser

Tabel 12 giver en lang række ligandbetegnelser, såvel præfikser til brug i koordinationsnavne som forkortelser til brug i formler. Man bemærker, at en del af præfikserne i tabellens første del er sat i parentes. Dette kan virke omstændeligt, men er hensigtsmæssigt for at undgå misforståelser.

Inden for ligandpræfikser er der en del forskelle på IUPAC- og CAS-nomenklatur (jf. 1.4).

Yderligere ligandpræfikser kan efter behov konstrueres som følger:

– *Systemnavne på anioniske ligander*, som ender på ‘id’ eller ‘at’, tilføjes endelsen ‘o’ og bliver derved til de tilsvarende ligandpræfikser, altså

| | |
|---|--|
| As ³⁻ | arsenido |
| B ³⁻ | borido osv. |
| PO ₄ ³⁻ | phosphato eller mere udførligt tetraoxidophosphato(3-) |
| CH ₃ COO ⁻ | (acetato) |
| (CH ₃) ₂ CO ⁻ | (propan-2-olato) |
| C ₆ H ₅ O ⁻ | (phenolato) osv. |

IUPAC foreskriver i denne kategori, at navnene på de *organiske* ligander generelt skrives i parentes.

– *Hydrocarbyl-ligandpræfikser* kan uden videre tages fra tabel 8 eller dannes tilsvarende (man får altså methyl, cyclopropyl osv.) og *acyl-ligandpræfikser* fra tabel 9 (altså ligandpræfikserne bliver formyl, acetyl osv.). De herved fremkomne præfikser behøver i øvrigt *ikke* at sættes i parentes.

– *Systemnavne på organiske ligander i øvrigt sættes i parentes og kan derefter anvendes som ligandpræfikser, fx (phthalocyanin) eller forkortet (H₂pc), jf. tabellerne 12.II og 14D.*

2.7. Øvrige elementer af IUPAC-nomenklaturen: tegnsætning, affikser, lokanter, stereokemiske deskriptorer

2.7.1. Tegnsætning

Tegnsætning i kemiske navne er i de fleste tilfælde ukompliceret og fremgår af eksemplerne rundt om i bogen. Det gælder anvendelse af komma, semikolon, kolon, punktum og bindestreg samt plus- og minustegn. Et særligt tegn i IUPAC-nomenklaturen er den *lange bindestreg* —, som anvendes i additionsnomenklatur (1.3.6.1, 3.8) og i nomenklatur for flerkernede kompleksforbindelser (3.9.2.1).

Parenteser anvendes bl.a. for at tydeliggøre substituentgruppers tilhørsforhold og kan være afgørende for betydningen af navnet, sml.

(cyclohexylmethyl)amin C₆H₁₁CH₂NH₂

og

cyclohexyl(methyl)amin C₆H₁₁NHCH₃

eller

(dimethylamido)trioxidosulfat [S[N(CH₃)₂]O₃][−]

og

dimethyl(amidotrioxidosulfat) S(NH₂)O(OCH₃)₂

Man skriver tilsvarende butan(dithiosyre) for CH₃CH₂CH₂CSSH for at undgå forveksling med butandi(thiosyre), der dog endnu bedre navngives butanbis(thiosyre), HSOCCH₂CH₂COSH (se 3.3.2.8).

Er der brug for parenteser på flere niveauer, anvendes i denne bog først (), dernæst [] på de efterfølgende niveauer, altså ...[[()]]... (IUPAC

foreskrev to andre, indbyrdes forskellige systemer i hhv. [2] og [6]). Der er dog undtagelser. Nomenklaturreglerne dikterer i visse tilfælde brug af en bestemt type parentes til et bestemt formål, uanset hvilket niveau, man befinder sig på [*runde parenteser* ved angivelse af visse multiple bindinger (2.3.1.2) og ved isotopsubstitution (3.12); *firkantede parenteser* i navne for brosubstituentgrupper (eksempler i tabel 8) og for annulener (2.3.2), i fusionsnavne (2.3.5.2), i von Baeyer-nomenklatur for ringsystemer (2.3.5.3), i navne på spiroforbindelser (2.3.5.4), i navne på afledninger af sammensætninger af identiske ringe (2.3.5.1), i koordinationsnavne for polymerer (3.10) samt ved isotopmærkning]. Eksempelvis (jf. 3.12) er $\text{di}[(^2\text{H}_1)\text{methyl}]\text{sulfoxid}$ ikke det samme som $\text{di}[(^2\text{H}_1)\text{methyl}]\text{sulfoxid}$.

For anvendelse af parenteser på flere niveauer i *formler* foreskriver IUPAC en anden rækkefølge end i navne. Vi har valgt at anvende rækkefølgen ...[[()]]... også i formler, bortset fra i koordinationsforbindelser, der har [] yderst, fx $[\text{CoF}_6]^{3-}$ (kan undlades i simple tilfælde), og når isotopmodifikation nødvendigvis gør en anden rækkefølge (se eksempler i 3.12).

2.7.2. Affikser (præfikser, infikser, suffikser)

Multiplikative præfikser er givet i tabel 2. Deres brug er eksemplificeret i forbindelse med de enkelte nomenklaturtyper (1.3) og talrige steder i kap. 2 og 3. Her skal blot nævnes, at præfikserne i anden kolonne altid bruges med efterfølgende parentes, også når misforståelser ikke er mulige, fx

| | |
|---|-------------------------|
| $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ | calciumbis(phosphat) |
| $[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_2]_4\text{N}^+$ | tetrakis(decyl)ammonium |

Affikserne ‘en’, ‘yn’, ‘dien’, ‘trien’, ‘diyn’ osv. tilkendegiver umættetheder. Deres brug, herunder den modifikation, der sker af stamhydridnavnet, er eksemplificeret i 2.3.1.

Præfikser og suffikser for substituentgrupper og ligander er behandlet i 2.4, 2.5 og 2.6.

Sammensætning af affikser kan føre til *vokalsammenstød*, fx tetraamminzink(2+); triethanolatoxidophosphor; 3,6,9,12,15-pentaaza~~o~~octadecan. Hovedreglen er, at begge vokaler bibeholdes; undtagelser er

- (1) Hantzsch-Widman-navne (2.3.4.2); det hedder 1,3-oxazol (ikke 1,3-oxa~~o~~azol) og 1,3,5,7-tetroxocan (ikke 1,3,5,7-tetra~~o~~xaocan).

- (2) Kombinationer af multiplikative præfikser, der ender på 'a', med suffikser, der begynder med 'a' eller 'o', altså hedder det cyclohexanhexol (ikke -hexaol), 1,3-diazinan-2,4,5,6-tetron (ikke -tetraon), naphthalen-1,2,7,8-tetramin (ikke -tetraamin).
- (3) Grundstofpræfikser i navne på forbindelser med gentagne enheder (kæder, 2.3.3; ringe, 2.3.4.2) mister det endestillede 'a' (men numeriske præfikser i samme navne gør *ikke*), fx cyclotetraazoxan (ikke cyclotetraazoxan, ej heller cyclotetrazoxan).

2.7.3. Lokanter

2.7.3.1. Lokanttyper

De lokanter – symboler til positionsangivelse – der optræder i nomenklaturen i nærværende bog, er:

- (1) *Numeriske lokanter*, fx i 2,4,6-trinitrotoluen
- (2) *Kursiverede grundstofsymboler*, evt. forsynede med superskripter, fx i ethanthiosyre-S-methylester, i N-bromsuccinimid og i N^{α} -methyl-L-tryptophan
- (3) *Indiceret hydrogen*, som forekommer i to situationer:
 - [a] I et umættet ringsystem til at skelne tautomerer, fx 1*H*-inden og 2*H*-inden (se tabel 5)
 - [b] Når indførelse af en karakteristisk gruppe i et umættet ringsystem nødvendiggør addition af hydrogen, hvis position så skal tilkendes; navngives eksempelvis barbitursyre (tabel 14A) ud fra pyrimidin (tabel 7), fås navnet pyrimidin-2,4,6(1*H*,3*H*,5*H*)-trion (her placeres det indicerede hydrogen altså ved lokanterne for den eller de grupper, der er »skyld« i de ekstra hydrogenatomer)
- (4) *Græske bogstaver* finder begrænset anvendelse som lokanter, nemlig kun i aminosyrenomenklaturen (3.11.1.1) samt til positionsangivelse i sidekæden indeholdende hovedfunktionen i et konjunktivt navn (1.3.6.2), fx β -bromnaphthalen-2-propionsyre, dss. 3-brom-3-(2-naphthyl)propionsyre.

2.7.3.2. Redundans i lokantanvendelsen

Brugen af lokanter beror delvis på et skøn. Det afgørende kriterium for, om en lokant skal med i navnet, er, om udeladelse kan gøre navnet tvetydigt. Fx er '2-' i 2-chloreddikesyre overflødig, da der intet H er i 1-positionen, som kan substitueres med chlor. I butan-2-on er situationen en anelse mere raf-

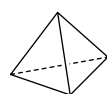
fineret, da oxogruppen godt kan sidde i 1-positionen; her er det på grund af nomenklaturreglerne, at '2-' er overflødig, da butan-1-on jo hedder butanal. Hvis lokanter spiller ækvivalente roller i navnet, vil man normalt ikke udelade nogle og beholde andre; det hedder fx 1,1,1-tribrom-2,2-difluorethan, selv om 1,1,1-tribromdifluorethan sådan set ikke kan misforstås.

2.7.4. Stereokemiske og strukturelle deskriptorer og præfikser

Pladsen tillader her kun en summarisk oversigt over de vigtigste stereokemiske deskriptorer. tabel 13 indeholder lidt flere med korte forklaringer.

2.7.4.1. Symboler for koordinationsgeometri

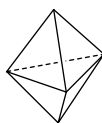
Specielt for koordinationsforbindelser er konstitutionen ikke altid nok til, at man kan slutte sig til geometrien af forbindelsen. Man kan da anvende symboler som de her viste:



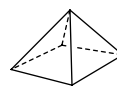
T- 4



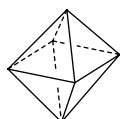
SP- 4



TBPY-5



SPY-5



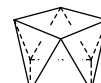
OC-6



TPR-6



CU-8



SAPR-8

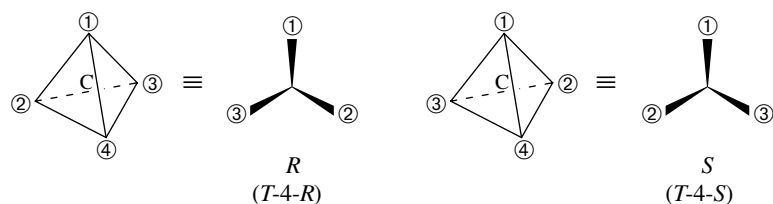
(Se eksempler nedenfor)

2.7.4.2. Sekvensreglerne

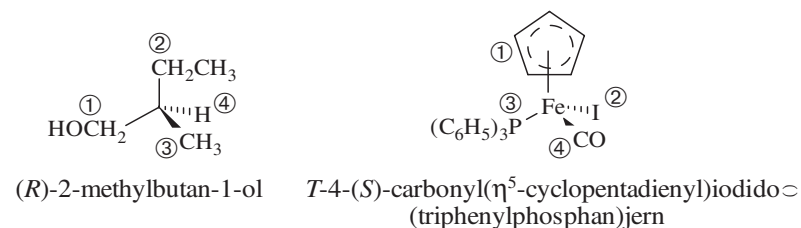
Flere af stereokemideskriptorerne kræver prioritering af substituentgrupper. Hertil anvendes *sekvensreglerne*, som er baseret på successiv optælling af atomer – vægtet efter atomnummer – i substituentgrupperne. Reglerne gennemgås i mange lærebøger; vi kan her henvise til den oprindelige artikel, hvori sekvensreglerne blev lanceret [7], og til stereokemireglerne hos IUPAC [3, section E; 5, s. 1-18].

2.7.4.3. Chiralitetsdeskriptorer

Den kendte konvention for anvendelse af deskriptorerne *R* og *S* er resumeret her:

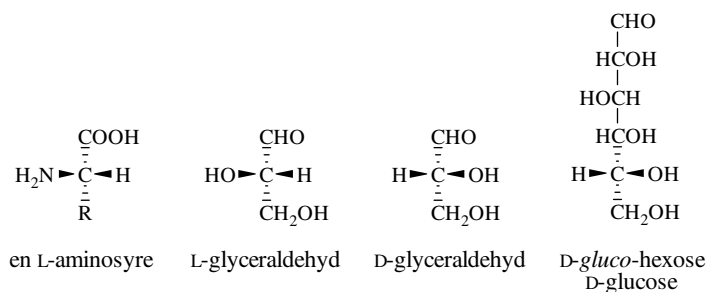


Prioritering af grupperne bundet til det asymmetrisk substituerede atom (vha. sekvensreglerne, 2.7.4.2) er forudsat. Konkrete eksempler på anvendelsen er:



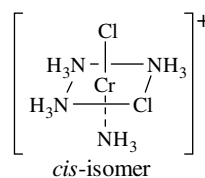
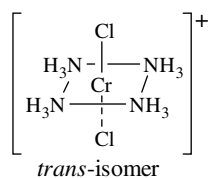
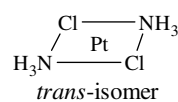
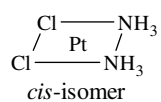
Bemærk her, at *R,S*-systemet ikke er begrænset til anvendelse på asymmetriske *carbonatomer*. (I det andet eksempel kræves endnu en konvention for at etablere prioriteringen af liganderne. Vedrørende η , se 3.9.2.3).

Deskriptorerne *R,S* er fri af konventioner vedrørende referencestrukturer, men er ofte vanskeligt gennemskuelige og har den ulempe, at mindre substitutioner langt væk fra det asymmetriske atom kan ændre prioriteringen efter sekvensreglerne, hvorved et måske relevant stereokemisk slægtskab mellem forbindelser tilsløres. På denne baggrund er det stadig tilladt i aminosyrenomenklaturen (3.11.1.1) og i carbohydratnomenklaturen (3.11.2) at anvende deskriptorerne *D* og *L*. Definitionen ud fra referenceforbindelsen glycerinaldehyd resumeres her:

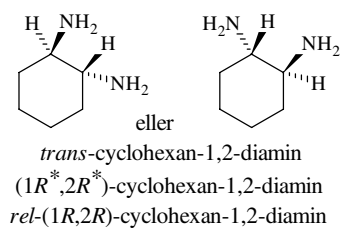
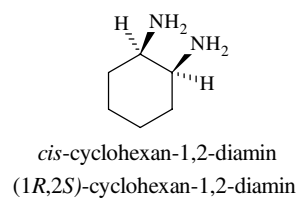


2.7.4.4. Deskriptorerne *cis*- og *trans*-

Deskriptorerne *cis*- og *trans*- kan anvendes i koordinationsforbindelser, som fx



og i visse ringsystemer med begrænset konformationsfrihed:

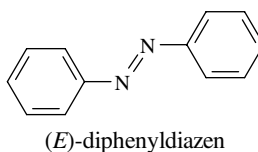
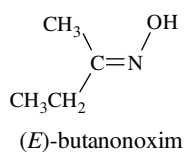
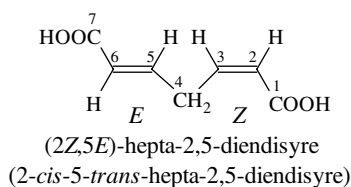
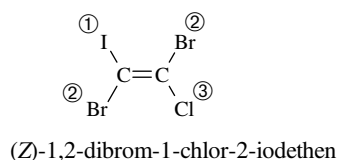
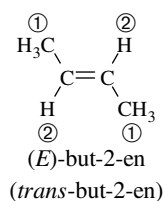
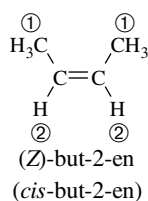


Bemærk, at *cis-trans*-beskrivelsen her er ækvivalent med en kombination af to chiralitetssymboler. Den venstre forbindelse er achiral, og deskriptoren (*1R,2S*) vælges frem for den dermed ækvivalente (*1S,2R*). Den højre forbindelse er chiral, og de to enantiomerer er (*1R,2S*)-, hhv. (*1S,2R*)-cyclohexan-1,2-diamin. De viste deskriptorer *R**, *S** og *rel* implicerer kun den *relative* konfiguration ved de to asymmetriske carbonatomer.

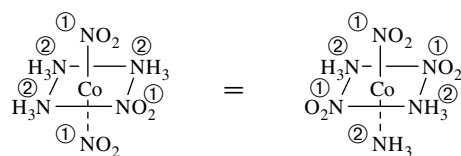
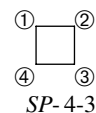
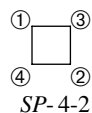
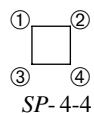
Den tidligere brug af *cis-* og *trans-* ved dobbeltbindinger tolereres stadig, men ønskes erstattet af *E,Z*-systemet (2.7.4.5).

2.7.4.5. Deskriptorer for geometrisk isomeri baseret på sekvensreglerne

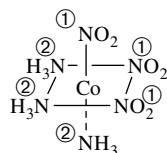
Brugen af deskriptorerne *E* og *Z* for systemer med dobbeltbindinger illustreres her:



For koordinationsforbindelser er et generelt system beskrevet i [10, IR-9.3], som for en række koordinationsgeometrier ud fra vægtning af liganderne efter sekvensreglerne angiver en stereokemisk deskriptor, der kombineres med konfigurationssymbolet, som fx



OC-6-21-triammintrinitrocobalt(III)

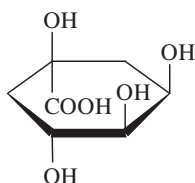


OC-6-22-triammintrinitrocobalt(III)

I de plankvadratiske konfigurationer angiver andet ciffer prioritetsnummeret for gruppen over for gruppen med nummer 1. For forklaringer med hensyn til oktaedriske og andre geometrier henvises til [10, IR-9.3]. Bemærk, at præfikserne *fac*- og *mer*- ikke mere anbefales for de her repræsenterede koordinationsgeometrier i systematiske navne.

2.7.4.6. Deskriptorerne α og β

Et yderligere sæt deskriptorer for plane eller idealiseret plane ringsystemer er α , β . Hvor *cis* og *trans* refererer til den relative position af grupper i forhold til ringen, forudsætter α og β en vedtagen definition af en overside og en underside, hvorefter α betyder nedenfor og β ovenfor. Disse symboler er meget anvendt i steroidkemi (3.11.5.1). Her eksemplificerer vi ved en cyclohexanforbindelse:



1L-1(OH),3,4/5-tetrahydroxycyclohexancarboxylsyre (IUPAC)
 (1*R*)-(1 α , 3 α , 4 α , 5 β)-1,3,4,5-tetrahydroxycyclohexancarboxylsyre (CAS)
 (-)-quinasyre

Bemærk i CAS-navnet (som vi har oversat til dansk), at en absolut deskriptor, her '(1*R*)', er nødvendig for at specificere den samlede absolute konfiguration. CAS-navnet er fuldt ud i overensstemmelse med IUPAC's regler. Det IUPAC-navn, der er anført her, hidrører fra en særskilt nomenklatur for cyclitoler (se *Kemiske Ord*), herunder cyclohexanhexoler (inositoler) og beslægtede forbindelser, for hvilken vi henviser til [5, s. 149-155].

2.8. Generelle regler for navngivning

2.8.1. Valg af navntype(r)

Første trin i navngivningen af en kemisk forbindelse er *valg af navntype(r)*: skal navnet baseres på substitutiv nomenklatur, radikofunktionel nomenklatur, koordinationsnomenklatur, ... (jf. 1.3.5)? IUPAC har ikke til dato udgivet nogen vejledning, som entydigt henviser brugerne til (en) bestemt(e) navntype(r) for enhver given forbindelse. Tendensen i de nyeste IUPAC-vejledninger [6,10] er at favorisere koordinationsnomenklatur (1.3.6.5), ikke mindst til uorganiske forbindelser, og substitutiv nomenklatur (1.3.8, navnlig 1.3.8.1), ikke mindst til organiske forbindelser. Ellers giver man specifikke anbefalinger for afgrænsede klasser af forbindelser, og vi gør tilsvarende her i kap. 3.

Det kan ofte være fordelagtigt eller nødvendigt at kombinere flere nomenklaturprincipper for at navngive en given forbindelse. Se fx i *Kemiske Ord* under pesticidet sulprofos: navnet involverer en udskiftningsoperation i henhold til 1.3.8.4 (dithio), en substitutiv operation i henhold til 1.3.8.1 og 2.5 (4-(methylsulfanyl)phenyl) samt en radikofunktionel konstruktion (phosphorsyre...ester, jf. 3.7.1).

2.8.2. Valg af stamforbindelse (hvis relevant)

Afhængigt af hvilken nomenklaturtype, man agter at anvende, skal man som det næste vælge en stamforbindelse og et tilhørende stamnavn, der derefter modificeres i henhold til reglerne for den pågældende nomenklaturtype. Eksempler på stamforbindelser er oxosyrer (3.4), stamhydrider (2.3), og, om man vil, centralatomerne i koordinationsnomenklatur.

I *substitutiv nomenklatur* vælges generelt de tidligere beskrevne stamhydrider som stamforbindelser. Der er en række forhold, der spiller ind ved dette valg.

Forekommer der i den givne forbindelse karakteristiske grupper, som kan tilkendes ved suffiks (tabel 11), er (eller har) den højst prioriterede gruppe (hvoraf der kan være flere i molekylet) *hovedfunktion* (eng.: den er *principal characteristic group*). Der kan kun være én type karakteristisk gruppe med hovedfunktion [undtagelser: se 3.3.2.7 (aldehyd-, amid- og anilidsyrer) og 3.5.4 (kombination af endelserne 'id', 'ium' og 'yl'), desuden i enkelte tilladte ikke-systematiske navne, fx glucosaminsyre (se *Ke-miske Ord*)].

I prioriteret rækkefølge skal man nu ved valg af stamforbindelse tage hensyn til følgende:

- (1) Er den givne forbindelse en *substituentgruppe*, skal stamforbindelsen indeholde atomet med den frie valens, og den skal vælges, så dette nummereres lavest muligt.
- (2) *Tilstedeværelse af karakteristiske grupper med hovedfunktion.*
Stamforbindelsen (acyklisk eller cyklisk) vælges, så den bærer eller indeholder gruppen med hovedfunktion, hvis der er netop én sådan, ellers så den bærer eller indeholder flest mulig sådanne grupper.
- (3) Efterlader (2) stadig valgmuligheder, anvendes følgende kriterier:
 - Står valget mellem flere *kæder*, vælges hovedkæden efter følgende kriterier, anvendt i den angivne prioriterede rækkefølge:
 - [a] Kæden med flest mulig multiple bindinger
 - [b] Længst mulige kæde
 - [c] Kæden mest flest mulig dobbeltbindinger

- [d] Kædevalget som giver lavest mulig nummerering af gruppen med hovedfunktion (se note nedenfor)
 - [e] Kædevalget som giver lavest mulig nummerering af multiple bindinger i det hele taget, dernæst lavest mulig nummerering af dobbeltbindinger (se note nedenfor)
 - [f] Kæden med flest mulig substituentgrupper, som skal anføres ved præfiks
 - [g] Kædevalget som giver lavest mulig nummerering af substituentgrupperne angivet ved præfiks (se note nedenfor)
 - [h] Kæden som indeholder de tidligst anførte substituentgruppepræfikser i det færdige navn
 - [i] Kædevalget som giver lavest lokant til den tidligst nævnte substituentgruppe
- Står valget mellem flere *ringsystemer*, vælges normalt efter følgende kriterier, igen anvendt successivt:
- [a] Heterocykler fremfor carbocykler
 - [b] Systemet med flest ringe
 - [c] Det mest umættede system

(De fuldstændige regler er mere komplicerede, se [3, s. 101-105], og i øvrigt p.t. (2007) under revision.)

- Står valget mellem en kæde og et ringsystem, vælges den »vigtigste« delstruktur som stamforbindelse. Overvejelser om hvad der er den vigtigste del forløber som diskuteret for hydriderne i 3.2.2.
- (4) Har (3) ikke ført til et entydigt valg af stamforbindelse, undersøges, om forbindelsen er egnet til navngivning som symmetrisk forbindelse med polyvalent substituentgruppe (1.3.8.2).

Note: Ved sammenligning af *sæt* af lokanter med henblik på valg af de laveste (for substituentgrupper, heteroatomer eller umættetheder) anvendes strengt leksikografisk ordning, dvs. 1,1,1,2,2 foretrækkes fremfor 1,1,2,2,2; 2,4,8 foretrækkes fremfor 2,6,8 osv.

En række forbindelser indeholdende karakteristiske grupper fra tabel 11 er godkendt til i sig selv at tjene som *stamforbindelser* med tilhørende *stam-*

navne, ofte etablerede trivialnavne eller semitrivialnavne, og *vedtagen nummerering* (eksempler: anisol, nicotinsyre, D-glucose, urinstof, barbituratsyre, jf. 3.11 og tabel 14) – hos IUPAC kaldet *functional parents*. Vælges en sådan *funktionel stamforbindelse*, er det underforstået, at den ikke lægges til grund for navngivning af derivater, der indholder karakteristiske grupper med *højere* prioritet end dem, der i forvejen er i stamforbindelsen.

Eksempelvis kan anisol, der er methoxybenzen, ikke lægges til grund for navngivning af vanillin, for hvilket i stedet må vælges benzaldehyd, så man får 4-hydroxy-3-methoxybenzaldehyd. Til gengæld er 3-propylanisol acceptabelt som alternativ til 1-methoxy-3-propylbenzen.

(Der er dog undtagelser, således navngives visse estere på særlig vis, fx glucosepentaacetat, se 3.7.2.2).

Det er vigtigt, at stamnavnet anvendes. Hvis methoxybenzen anvendes for anisol, kan 3-propyl ikke foranstilles.

2.8.3. Nummerering af stamforbindelse og substituentgrupper

I nævnte rækkefølge skal tages hensyn til følgende:

- (1) Fast nummerering af ringsystemer og visse andre stamforbindelser, herunder funktionelle stamforbindelser (se 2.8.2)
- (2) Heteroatomer i heterocykliske forbindelser skal have lavest mulige numre (se note i 2.8.2)
- (3) Indiceret hydrogen (se 2.7.3.1) nummereres lavest muligt
- (4) Karakteristiske grupper med hovedfunktion nummereres lavest muligt (se note i 2.8.2)
- (5) Heteroatomer i acykliske stamhydrider nummereres lavest muligt (se note i 2.8.2)
- (6) Er der tale om en substituentgruppe, skal positionen med den frie valens nummereres lavest muligt
- (7) Umættetheder nummereres lavest muligt (se note i 2.8.2)
- (8) Substituentgrupper nummereres lavest muligt (se note i 2.8.2)
- (9) Den tidligst anførte substituentgruppe nummereres lavest muligt

I kraft af princippet om alfabetisk rækkefølge af substituentgruppepræfikser (1.3.8.1) kan (9) medføre, at nummereringen er afhængig af navngivning af substituentgrupperne (anvendes butan-2-yl i stedet for 1-methylpropyl, kan nummereringen skifte, se fx secbumeton i *Kemiske Ord*).

Litteratur

- [1] O. Bostrup: Sådan gik det til – en nutidshistorisk note om grundstofnavne, *Dansk Kemi* **76**(1) (1995) 32-33.
T. Damhus, S.E. Harnung: Endelig ro om grundstofnavnene, *Dansk Kemi* **78** (10) (1997) 10-12.
- [2] IUPAC, *Nomenclature of Inorganic Chemistry (Recommendations 1990)*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990. Nu afløst af [10].
- [3] IUPAC, *Nomenclature of Organic Chemistry (1979 Edition, Sections A, B, C, D, E, F and H)*, Pergamon Press, Oxford, 1979.
- [4] D. Babić et al.: Nomenclature and Coding of Fullerenes, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **35** (1995) 515-526.
A. T. Balaban et al.: W. R. Hamilton – His Genius, His Circuits, and the IUPAC Nomenclature for Fullerenes, *J. Chem. Educ.* **72** (1995) 693-698.
A. L. Goodson et al.: Numbering and Naming of Fullerenes by Chemical Abstracts Service, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **35** (1995) 969-978.
- [5] IUBMB, *Biochemical Nomenclature and Related Documents – A Companion*, 2nd Edition, Portland Press, London, 1992.
- [6] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993.
- [7] R. S. Cahn, C. K. Ingold, V. Prelog: The Specification of Asymmetric Configuration in Organic Chemistry, *Experientia* **12** (1956) 81-94.
- [8] IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (G. P. Moss): Nomenclature of fused and bridged fused ring systems (IUPAC Recommendations 1998), *Pure Appl. Chem.* **70**(1) (1998) 143-216.
- [9] IUPAC, Inorganic Chemistry Division (W.H. Koppenol): Naming of New Elements (IUPAC Recommendations 2002), *Pure Appl. Chem.* **74** (5) (2002) 787-791.
- [10] *Nomenclature of Inorganic Chemistry (IUPAC Recommendations 2005)*, RSC Publishing, Cambridge, 2005.