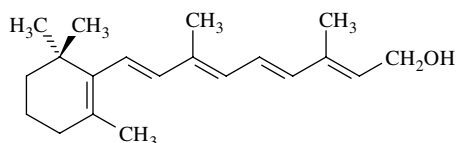


## 3. IUPAC-nomenklatur efter stofklasser



(2*E*,4*E*,6*E*,8*E*)-3,7-dimethyl-9-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-en-1-yl)  
nona-2,4,6,8-tetraen-1-ol  
retinol

### 3.1. Neutrale molekulære forbindelser: indledning

Dette er en omfattende klasse, idet såvel de fleste af de organiske forbindelser som mange uorganiske hydrider og forbindelser mellem ikke-metaller er med. Der er imidlertid overordnede nomenklaturprincipper, som er gyldige hen over disse kategorier, så det kan godt svare sig at behandle dem alle under samme overskrift.

Næsten alle konstruktionsmåderne for IUPAC-navne omtalt i 1.3 finder anvendelse inden for klassen af neutrale molekulære forbindelser. De indgående delnavne og stamnavne er først og fremmest dem, som vi introducerede i kap. 2.

Mest fremtrædende er: den simple *binære nomenklatur* (1.3.6.3), eksempelvis

As <sub>4</sub> O <sub>10</sub>	tetraarsendecaoxid
HCN	hydrogencyanid
SF <sub>6</sub>	svovlhexafluorid
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Br	propylbromid
CH <sub>3</sub> COOC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	ethylacetat, ethylethanoat

$\text{PO}(\text{OCH}_3)_3$  trimethylphosphat;

*substitutiv nomenklatur* (1.3.8.1), som i

$\text{SF}_6$	hexafluor- $\lambda^6$ -sulfan
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$	1-brompropan
$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	2,2,4-trimethylhexan
$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{As}$	triphenylarsan;

samt *koordinationsnomenklatur* (1.3.6.5), som i

$\text{SF}_6$	hexafluoridosvovl(VI)
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_3(\text{NO}_2)_3]$	triammintrinitrocobalt(III)
$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{As}$	triphenylarsen(III)
$\text{PO}(\text{OCH}_3)_3$	trimethanolatooxidophosphor.

Endvidere finder den *radikofunktionelle nomenklatur*, nomenklatur baseret på navne på karakteristiske grupper og substituentgrupper (1.3.6.4), en vis anvendelse, fx

$\text{PO}(\text{OCH}_3)_3$	phosphorsyretrimethylester
$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$	eddikesyreethylester, ethansyreethylester
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}$	benzylalkohol
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{COCH}_3$	isobutylmethylketon

Som det ses, kan en given forbindelse ofte gives navne af flere typer. I overensstemmelse med almindelig praksis vil vi foreslå, at man for neutrale molekulære forbindelser, der *ikke* er eksplicit behandlet i de følgende afsnit

- anvender *binær nomenklatur*, når det drejer sig om forbindelser, for hvilke man kun tilsigter at meddele eller kun kan meddele molekylformlen, evt. blot bruttoformlen for forbindelsen;
- anvender *substitutiv nomenklatur* for molekulære hydridler og afledte forbindelser, for hvilke man ønsker, at navnet giver information om konstitutionelle forhold såsom tilstedeværelse af ringe og kæder samt substituentgrupperes placering på disse;
- anvender *koordinationsnomenklatur* for metalkomplekser og for forbindelser, hvor opbygning omkring et eller nogle få centralatomer ønskes betonet.

IUPAC tilskynder endvidere til i almindelighed at udvide brugen af koordinationsnomenklatur, også i tilfælde, hvor ældre, mere komplicerede konstruktioner stadig tillades; se fx diskussionen af afledninger af uorganiske oxosyrer i 3.4.3.1 og 3.4.3.2 og af estere i 3.7.3.

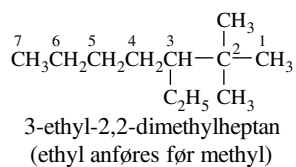
## 3.2. Hydrider afledt af stamhydrider

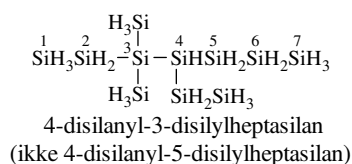
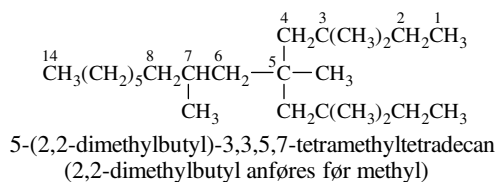
Det drejer sig her om at fastlægge regler for kombination af de navnekomponenter, vi introducerede i kap. 2, ved navngivning af hydrider, som indeholder forgrenede kæder eller kæder og ringe samtidig. Vi behandler i det følgende kun de regler, man hyppigst får brug for, og henviser i øvrigt til [1-3].

### 3.2.1. Acykliske, homonukleare hydrider (forgrenede kæder)

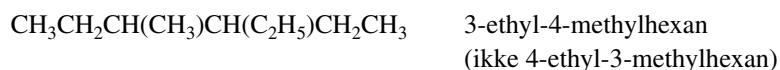
Hovedprincippet er substitutivt. Navnet baseres på stamhydridet svarende til den længste (underforstået uforgrenede) kæde i molekylet (hovedkæden). Alle sidekæder behandles som substituentgrupper (i det følgende ofte blot kaldet *substituent*), hvis placering på hovedkæden angives ved en numerisk lokant. Nummerering af hovedkæde og substituent sker i henhold til 2.8.3. Ved tilstedeværelse af flere ens substituent anvendes det relevante numeriske præfiks fra tabel 2.

$\text{BH}_2\text{B}(\text{BH}_2)\text{BH}_2$	2-boranyltriboran(5)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	3-methylpentan (ikke 2-ethylbutan)
$\text{SiH}_3\text{SiH}(\text{SiH}_3)\text{SiH}_3$	2-silyltrisilan (ikke 1,1-disilyldisilan)
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$	5-methylhex-1-en (ikke 2-methylhex-5-en, jf. 2.8.3)





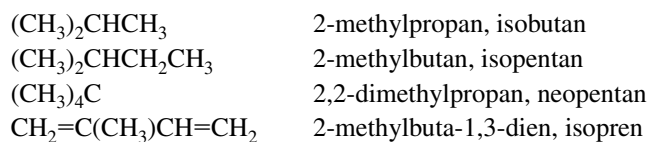
(Bemærk i denne forbindelse substituentnavnet silyl, som svarer til methyl, og disilanyl, som svarer til ethyl, jf. tabel 8).



I det generelle tilfælde anvendes følgende regler successivt ved valg af hovedkæde og dermed fastlæggelse af stamhydridet:

1. Den kæde, der har *flest umættetheder*, vælges.
2. Er der stadig flere valg, tages den *længste* kæde.
3. Kæden med *flest dobbeltbindinger* vælges.
4. Kæden med *flest sidekæder* vælges.
5. Den kæde, hvis *sidekæder* ved navngivningen vil få *laveste numre (lokanter)*, vælges.

Nogle få forgrenede acykliske carbonhydrider har fået lov at beholde deres hævdivundne trivialnavne, men kan ikke bruges som stamhydrider:



### 3.2.2. Homonukleare hydrider indeholdende ringe og kæder

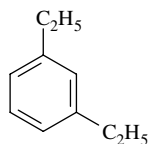
For at kunne navngive sådanne forbindelser substitutivt skal vi igen udpege stamhydrider og modificere disses navne med substituentnavne. Stamhydridet vil i hvert tilfælde enten være en rent cyklisk, eventuelt polycyklisk, forbindelse eller være baseret på én uforgrenet kæde. De vigtigste undtagelser er de tre forbindelser toluen, styren og stilben (se tabel 4), som vi omtaler nedenfor i dette afsnit, visse terpen- og steroidforbindelser (se 3.11 og tabel 5) samt visse komplicerede stamhydrider af biokemisk eller naturstofkemisk betydning (se fx bilan, tabel 14D).

IUPAC's regler for valg mellem cyklisk og acyklisk stamhydrid er ikke udtømmende; det ville også blive uhyre kompliceret. Men man siger bl.a., at

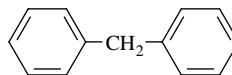
- [a] hvis der er flere kæder bundet til ét ringsystem, vælges det til ringsystemet svarende stamhydrid;
- [b] er der flere ringe bundet til én kæde, vælges det til kæden svarende stamhydrid;
- [c] er en »stor« eller kompleks gruppe (fx en gruppe med mange substituentter) bundet til en mindre eller mindre kompleks gruppe (altså fx en gruppe med færre substituentter), vælges stamhydridet svarende til den store eller komplekse gruppe, og den mindre gruppe bliver substituent.

Med hensyn til nummerering af multipelt substituerede ringe (i tilfælde, hvor nummereringen ikke allerede ligger fast ud fra stamhydridets struktur) vælges den nummerering, der giver den først anførte substituent lavest lokant.

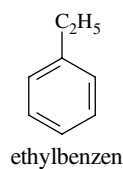
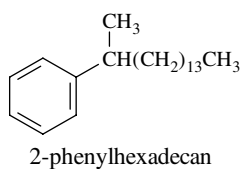
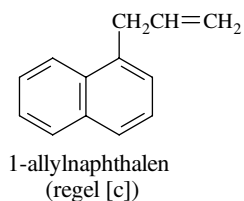
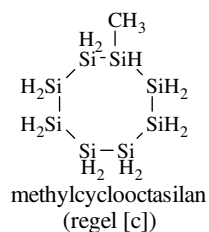
I praksis vil disse regler kunne hjælpe et langt stykke hen ad vejen.



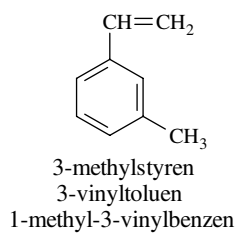
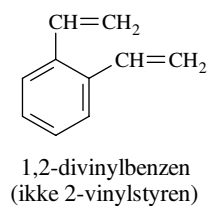
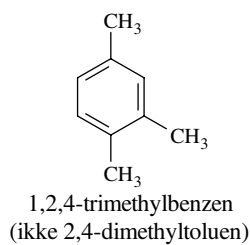
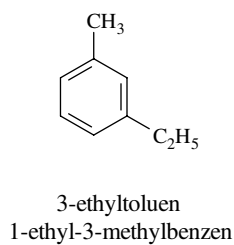
1,3-diethylbenzen  
(regel [a])

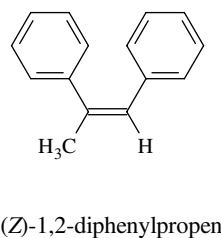
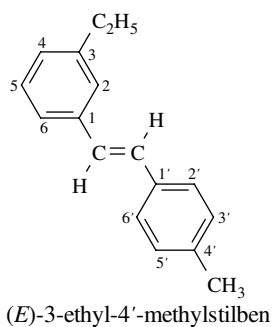


diphenylmethan  
(regel [b])

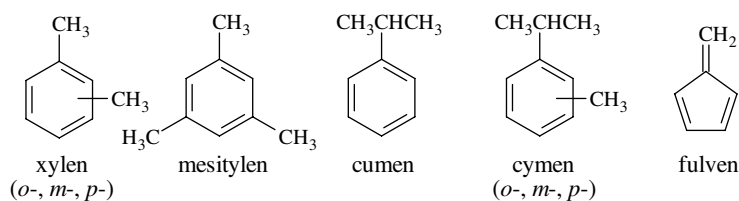


Forbindelser fremkommet ved ringsubstitution i **toluen**, **styren** og **stilben** kan navngives ud fra disse stamhydrider, dog således, at man ved tilføjelse af yderligere methylgrupper til toluen og yderligere vinylgrupper til styren *skal* tilbage til navngivning ud fra benzen:





Nogle få substituerede benzenforbindelser samt fulven har fået lov at beholde deres hævdvundne trivialnavne, men kan ikke bruges som stamhydrider:



Fulvalen (triv.) er 1,1'-bi(cyclopenta-2,4-dien-1-yliden) (1.3.9.2).

### 3.2.3. Heteronukleare hydrider

Herved vil vi forstå hydrider, hvor der i en (side)kæde eller ring indgår mindst to af grundstofferne C, Si, Ge, Sn, Pb, N, P, As, Sb, Bi, O, S, Se, Te, Po. Der er ikke nogen overordnede regler, der fastlægger navngivningen af en hvilken som helst forbindelse af denne art (IUPAC skriver direkte, at man stadig har emnet under overvejelse); men en lang række af dem kan navngives ud fra stamhydriderne angivet i kap. 2, enten ved brug af substitutiv nomenklatur (1.3.8.1), som i fx

$\text{CH}_3\text{BHBHBHCH}_3$	1,3-dimethyltriboran(5)
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$	diethylsulfan
$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{Sb}$	triphenylstiban
$(\text{CH}_3)_5\text{As}$	pentamethyl- $\lambda^5$ -arsan
$\text{CH}_3(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{C}_3\text{H}_7)\text{N}$	ethyl(methyl)propylazan, ethyl(methyl)propylamin

$\text{CH}_3\text{NHNHNHC}_3\text{H}_7$  1-methyl-3-propyltriazan

eller nomenklatur for udskiftning af skeletcarbonatomer (1.3.8.3), eksempelvis for liganden benzo-15-krone-5:

5,8,11,14,17-pentaoxa-6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17-dodecahydro-5H-cyclo[15]annulen

(for strukturen af det tilsvarende carbocycliske stamhydrid, se 2.3.5.2).

Nogle af disse forbindelser er allerede selv medtaget som stamhydrider i kap. 2, eksempelvis siloxaner. En række af dem indeholder endvidere karakteristiske grupper, som henfører dem til én (eller flere) af kategorierne i 3.3, eksempelvis aminer, ethere (herunder epoxider), sulfider. Af hensyn til denne traditionelle klassifikation behandler vi dem i detaljer i 3.3 snarere end her.

Endelig vil visse forbindelser kunne navngives substitutivt ud fra acykliske nitrogenholdige stamforbindelser fra tabel 14C, fx  $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{N}=\text{C}=\text{NC}_6\text{H}_{11}$ , dicyclohexylcarbodiimid.

### 3.3. Afledte forbindelser med karakteristiske grupper

Hovednomenklaturprincippet her er substitutivt (1.3.8.1), baseret på stamhydridnavne (carbonhydrider såvel som andre hydrider efter omstændighederne). Substituenten angives med præfikser eller suffikser, hvoraf mange er opregnet i tabellerne 8, 9, 10 og 11, forsynet, om fornødent, med multiplikative præfikser (tabel 2) og lokanter (2.7.3). Karakteristiske grupper, der kan angives ved suffiks, prioriteres i henhold til tabel 11, og den højst prioriterede (*den principale karakteristiske gruppe* eller *hovedfunktionen*), angives ved suffiks, de øvrige ved præfiks.

De systematiske navne for picrinsyre og purpurogallin (triv.), se hhv. 3.3.1.2 og 3.3.2.4, er eksempler på sådanne substitutive navne. Den substitutive navngivning er sædvanligvis fremkommelig og er normalt underforstået at være en mulighed, også hvis den ikke nævnes eksplicit i det følgende. Derudover er flere traditionelle navnetyper stadig accepterede i IUPAC-systemet, herunder *radikofunktionelle navne* (1.3.6.4) og navne indeholdende *funktionelle modifikatorer*, som fx kanelaldehydoxim ('oxim')



modificerer aldehydfunktionen, se 3.3.2.6) og maleinsyreanhydrid (modifikator 'anhydrid', jf. 3.3.2.8).

Bemærk, at den samme forbindelse ofte optræder flere gange i eksemplerne nedenfor netop for at illustrere alternative navngivningsmetoder.

### 3.3.1. Forbindelser med karakteristiske grupper, der ikke kan optræde som hovedfunktion

#### 3.3.1.1. Halogenforbindelser, azider og isocyanider; cyanater, isocyanater og chalcogenanaloger dertil

*Substitutive navne* konstrueres med præfikser fra tabel 10:

$\text{SiF}_4$	tetrafluorsilan
$\text{CH}_2=\text{CF}_2$	1,1-difluorethen
$\text{C}_6\text{H}_6\text{Cl}_6$	hexachlorcyclohexan
$\text{N}_3\text{P}_3\text{Cl}_6$	hexachlorcyclotriphosphazatrien (jf. 2.3.4)
$\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_3(\text{NCO})_2$	diisocyanatotoluen (fx 2,4-)
$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\text{NCS}$	3-isothiocyantoprop-1-en
$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3$	azidobenzen
$\text{C}_6\text{H}_5\text{IO}$	iodosylbenzen

Bemærk i det sjette eksempel, at umættetheden tilgodeses før substituenten ved valg af lavest mulige lokant (2.8.3).

*Binære navne* konstrueres ved brug af suffikserne fra tabel 10 (når sådanne ellers er angivet):

$\text{SiF}_4$	siliciumtetrafluorid
$\text{CH}_2=\text{CF}_2$	vinylidendifluorid
$\text{CH}_3\text{COBr}$	acetylbromid
$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_3$	phenylazid
$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\text{NCS}$	allylisothiocyant

Vedrørende cyanider, se 3.3.2.8 under nitriler. Vedrørende navne af typen glucopyranosylbromid, se 3.11.2.4.

Nogle få trivialnavne for simple halogenforbindelser accepteres stadig, nemlig:

CHF<sub>3</sub>, fluoroform; CHCl<sub>3</sub>, chloroform; CHBr<sub>3</sub>, bromoform; CHI<sub>3</sub>, iodoform; COCl<sub>2</sub>, phosgen; CSeCl<sub>2</sub>, thiophosgen; CSeCl<sub>2</sub>, selenophosgen.

### 3.3.1.2. Nitro-, nitroso- og diazoforbindelser

Disse kan *kun* navngives *substitutivt*:

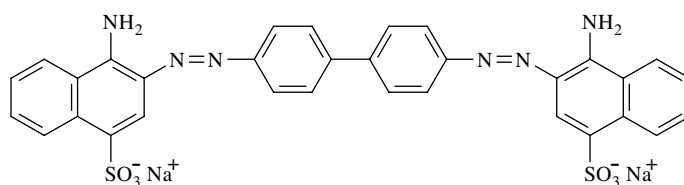
C(NO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	tetranitromethan
2,4,6-(NO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> OH	2,4,6-trinitrophenol
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO	nitrosobenzen
CH <sub>2</sub> =N <sup>+</sup> =N <sup>-</sup>	diazomethan

Forbindelsen 2,4,6-trinitrophenol har det IUPAC-godkendte trivialnavn p-icrinsyre.

### 3.3.1.3. Azo- og azoxyforbindelser

Azoforbindelser indeholder den karakteristiske gruppe –N=N– bundet til to hydrocarbylgrupper. Den tidligere nomenklatur for individuelle forbindelser baseret på præfikset ‘azo’ er imidlertid afløst af substitutiv nomenklatur baseret på stamhydridet diazen, HN=NH:

C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> –N=N–C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	diphenyldiazen (tidligere azobenzen)
CH <sub>3</sub> –N=N–CH <sub>3</sub>	dimethyldiazen (tidligere azomethan)
CH <sub>2</sub> =CH–N=N–CH <sub>3</sub>	methyl(vinyl)diazen (tidligere ethenazomethan)



4,4'-diamino-3,3'-[(biphenyl-4,4'-diyl)bis(diazendiyl)]bis(naphthalen-1-sulfonsyre)dinatriumsalt

Azoxifyorbindelser svarer til azoforbindelser, men har gruppen –N=N(O)– bundet til hydrocarbylgrupper. Forbindelserne navngives som diazenoxid-derivater:

C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> –N=N(O)–C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	diphenyldiazenoxid (tidligere azoxybenzen)
---	--

$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{N}(\text{O})=\text{N}-\text{CH}_3$  1-methyl-2-vinyldiazen-2-oxid

### 3.3.2. Forbindelser med karakteristiske grupper, der kan optræde som hovedfunktion

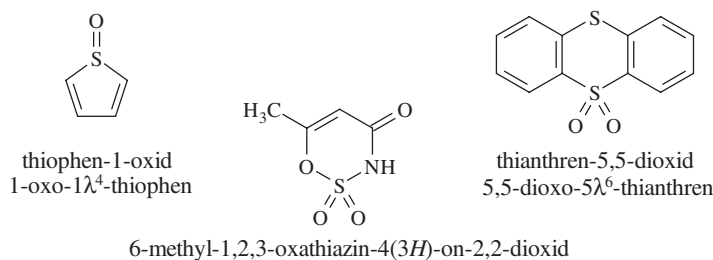
Tabel 11 anvendes ved afgørelse af, hvilken eller hvilke karakteristiske gruppe(r), der er hovedfunktion i en given forbindelse, jf. 2.8.2.

#### 3.3.2.1. Peroxider, hydroperoxider, sulfoxider og sulfoner samt chalcogenanaloger

**Som hovedfunktion:** radikofunktionelle navne (hvoraf nogle ligeså godt kunne opfattes som binære navne, fx de første fem eksempler givet her):

$t\text{-BuOOH}$	<i>tert</i> -butylhydroperoxid
$\text{C}_2\text{H}_5\text{SSH}$	ethylhydrodisulfid
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}-\text{OO}-\text{OCC}_6\text{H}_5$	dibenzoylperoxid
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OOC}_2\text{H}_5$	ethylphenylperoxid
$[(\text{NO}_2)_2\text{C}_6\text{H}_3\text{CH}_2]\text{SeSe}[\text{C}_{10}\text{H}_6(\text{CH}_3)]$	(2,4-dinitrobenzyl)(1-methyl-2-naphthyl)diselenid
$\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{CH}_3$	dimethylsulfoxid
$\text{CH}_3\text{S}(\text{O})_2\text{CH}_3$	dimethylsulfon

Angivelse af ringbundne sulfoxid- og sulfongrupper sker som eksemplificeret her (dvs. analogt til navngivning af aminoxider, 3.3.2.3):



De anførte alternative navne repræsenterer en afvigelse fra reglen om at anføre hovedfunktionen vha. suffiks. Navnet på den midterste forbindelse har til gengæld på en måde to suffikser. Vi håber på klarere regler fra IUPAC i forbindelse med igangværende (2007) revisioner af [1,2].

**Som underordnet substituent:**

$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}(\text{OOH})\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_6\text{CH}_2\text{COOH}$	13-hydroperoxyoctadeca-9,11-dioensyre
$\text{HOOC}(p\text{-C}_6\text{H}_4)\text{OO}(p\text{-C}_6\text{H}_4)\text{COOH}$	4,4'-peroxydibenzoesyre
$\text{HOOCCH}(\text{NH}_2)\text{CH}_2\text{-SS-CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$	2,2'-diamino-3,3'-(disulfandiyl)dipropanoisyre, cystin (jf. tabel 15)
$\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{CH}_3$	sulfinyldimethan
$p\text{-CH}_3\text{S}(\text{O})(\text{C}_6\text{H}_4)\text{NH}_3^+\text{Cl}^-$	4-(methylsulfinyl)aniliniumchlorid
$m\text{-CH}_3\text{Se}(\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_4)\text{NH}_3^+\text{Br}^-$	3-(methylselenonyl)aniliniumbromid

Bemærk, at det andet, tredje og fjerde eksempel er af typen *symmetrisk forbindelse med polyvalent substituentgruppe*, jf. 1.3.8.2. Se et andet navn for cystin i 3.3.2.2.

Når en peroxy- eller disulfidgruppe sidder som bro i et ringsystem, anvendes præfikserne 'epidioxy' og 'epidithio', altså fx 9,10-epidioxy-9,10-dihydroanthracen (jf. en analog epoxyforbindelse i 3.3.2.2).

**3.3.2.2. Ethere og acetaler samt chalcogenaloger dertil**

**Som hovedfunktion:** ethere navngives radikofunktionelt ved brug af endelsen 'ether', de chalcogenaloge ved hjælp af endelserne 'sulfid', 'selenid', 'tellurid' (de sidste kan efter behag opfattes radikofunktionelt eller binært):

$\text{CH}_3\text{OCH}_3$	dimethylether
$\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_3$	ethylmethylsulfid
$(1\text{-C}_{10}\text{H}_7)\text{Te}(2\text{-C}_{10}\text{H}_7)$	(1-naphthyl)(2-naphthyl)tellurid

Acetaler, herunder ketaler, navngives med de funktionelle modifikatorer 'acetal' og 'ketal' ud fra de tilgrundsiggende oxoforbindelser:

$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OCH}_2\text{CH}_3)_2$	acetaldehyddiethylacetal
$(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{C}(\text{SCH}_3)_2$	benzophenondimethyldithioketal

Ved mere komplicerede forbindelser foretrækkes et substitutivt navn, jf. nedenfor.

**Navngivning med substituentpræfikser:**

$o\text{-(CH}_3\text{O)}_2\text{C}_6\text{H}_4$	1,2-dimethoxybenzen
$\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CH}_2\text{CH(NH}_2\text{)COOH}$	2-amino-4-(methylsulfanyl)butansyre, methionin
$\text{CH}_3\text{CH(OCH}_2\text{CH}_3)_2$	1,1-diethoxyethan
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH(OCH}_2\text{CH}_3\text{)(SCH}_3\text{)}$	[(methylsulfanyl)(phenyl)methoxy]et- han

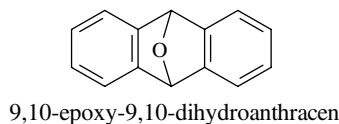
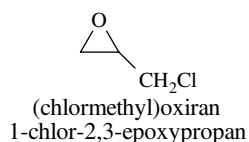
Bemærk, at det traditionelle præfiks 'methylthio' for  $\text{CH}_3\text{S-}$  er på vej ud. Vedrørende ethere og acetalder afledt af carbohydrater, se 3.11.2.4.

**Ved udskiftningsnomenklatur (»a-nomenklatur«):** se 1.3.8.3. Anvendes ved cykliske ethere, polyethere og analoger og i øvrigt efter skøn, hvis ovenstående metoder fører til for uhåndterlige navne. Ved cykliske forbindelser baseret på op til 10-leddede ringe er Hantzsch-Widman-nomenklaturen (H-W) et ofte benyttet alternativ, jf. 2.3.4.2.

oxacyclopropan	oxiran (H-W), se tabel 5
1,4-dioxacyclohexan	1,4-dioxan (H-W), se tabel 5
[12]anS <sub>4</sub>	1,4,7,10-tetrathiacyclododecan (jf. tabel 12)
18-krone-6	(se venstre figur allerførst i kap. 2)
$\text{HOOCCH(NH}_2\text{)CH}_2\text{-SS-CH}_2\text{CH(NH}_2\text{)COOH}$	2,7-diamino-4,5-dithiaoctandisyre, cystin

(Se et andet navn for cystin i 3.3.2.1.)

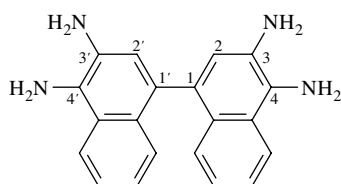
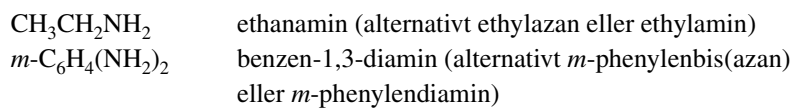
Oxiranderivater kan navngives som sådanne eller ved brug af præfikset 'epoxy' (se fx vernolsyre og violaxanthin i *Kemiske Ord*). Dette anvendes også, når en ethergruppe danner bro i et ringsystem.



Navnet anisol er IUPAC-anerkendt for forbindelsen methyl(phenyl)ether, men kan kun anvendes som stamnavn for så vidt angår substitution i ringen.

### 3.3.2.3. Aminer, iminer, hydroxylaminer, ainoxider, hydraziner og nogle af deres phosphor-, arsen- og antimonanaloger

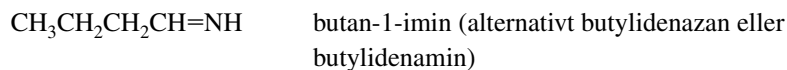
**Som hovedfunktion:** se først 3.2.3. Ud over de dér antydede substitutive navnetyper, baseret på stamhydridnavnene azan eller amin (for  $\text{NH}_3$ ), di-azan (for  $\text{H}_2\text{NNH}_2$ ), fosphan (for  $\text{PH}_3$ ), diphosphan (for  $\text{P}_2\text{H}_4$ ), arsan (for  $\text{AsH}_3$ ) og stiban (for  $\text{SbH}_3$ ), kan **aminer** af typen  $\text{R}(\text{NH}_2)_n$  navngives ved en konstruktion, hvor endelsen 'amin' sættes direkte på navnet for stamforbindelsen  $\text{RH}_n$ , forsynet med det til  $n$  svarende multiplikative præfiks (tabel 2), eksempelvis:



[1,1'-binaphthalen]-3,3',4,4'-tetramin

Bemærk, at ved vokalsammenstød mellem *multiplikativt præfiks* og *substituentensuffiks* elimineres slutvokalen 'a' på præfikset, jf. 2.7.2.

En lignende konstruktion er mulig for **iminer**:



$(\text{CH}_3)_2\text{CH}=\text{NCH}_3$  *N*-methylpropan-2-imin (alternativt *N*-methylisopropylidenamin)

(Navne af typen butyraldehydimin og acetoneimin synes ikke velsete af IUPAC mere).

En række aminer og andre nitrogenforbindelser har accepterede ikke-systematiske stamnavne, se tabellerne 6, 7, 14C og 14D.

For *hydroxylaminer* anvender man sædvanligvis hydroxylamin selv som stamforbindelse og får derved navne som

$\text{C}_6\text{H}_5\text{NHOH}$  *N*-phenylhydroxylamin  
 $\text{C}_6\text{H}_5\text{ONH}_2$  *O*-phenylhydroxylamin

*Aminoxider* og disses *phosphoranaloger* navngives ved efterstilling af '-*N*-oxid', hhv. '-*P*-oxid', eller, i tilfælde af at nitrogenet (phosphoret) er del af et ringsystem, af 'oxid' forsynet med den relevante numeriske lokant, analogt til sulfoxidnavnene (3.3.2.1): nitrilotriethanol-*N*-oxid, pyridin-1-oxid, cinnolin-2-oxid (jf. tabel 7), triphenylphosphan-*P*-oxid.

#### *Som underordnet substituent*

$p\text{-H}_2\text{NC}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{H}$  4-aminobenzensulfonsyre, sulfanilsyre (jf. tabel 14D)  
 $p\text{-(CH}_3)_2\text{NC}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{H}$  4-(dimethylamino)benzensulfonsyre, *N,N*-dimethylsulfanilsyre  
 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}=\text{N}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$  4-(isopropylidenazanyl)butyronitril eller 4-(isopropylidennitrilo)butyronitril  
 $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2-\text{N}=\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$  4-(isopropylazanyliden)butyronitril eller 4-(isopropylnitrilo)butyronitril  
 $p\text{-HONHC}_6\text{H}_5\text{OH}$  4-(hydroxyamino)phenol  
 $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{P(O)}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CONH}_2$  3-(diphenylphosphinoyl)propionamid

Bemærk i iminnavnene de to forskellige muligheder for navngivning af en sammensat substituent (jf. 2.5.1, 2.5.2). For flere eksempler på iminnavne, se Schiff-base-ligandnavnene i tabel 12.

### 3.3.2.4. Hydroxyforbindelser, herunder alkoholer, halvacetaler og phenoler, samt chalcogenanaloger hertil

**Som hovedfunktion:** for forbindelser af typen  $R(XH)_n$ , hvor  $X = O, S, Se$  eller  $Te$ , tilføjes endelserne hhv. 'ol', 'thiol', 'selenol' eller 'tellurol', forsynet med det relevante multiplikative præfiks (tabel 2), til navnet på stamforbindelsen  $RH_n$ . Bemærk elimination af endestillet 'a' (2.7.2), således at man får endelserne 'tetrol', 'pentol' osv.

Betegnelsen mercaptan er forladt.

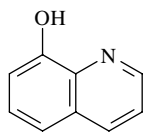
Halvacetaler og analoger navngives tilsvarende eller radikofunktionelt ved hjælp af de funktionelle modifikatorer 'hemiacetal' og 'hemiketal'.

**Som underordnet substituent:** for substituenterne  $-OH, -SH, -SeH, -TeH$  anvendes præfikserne 'hydroxy', 'sulfanyl', 'selanyl', 'tellanyl'. *NB:* præfikserne 'mercapto' og 'hydro-seleno' er forladt.

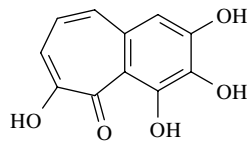
Eksempler på begge konstruktioner:

$SiH_3SiH_2OH$	disilanol
$CH_3CH_2OH$	ethanol
$CH_3CH(OCH_2CH_3)OH$	1-ethoxyethanol, acetaldehydethylhemiacetal
$CH_3CH_2CH_2CH_2SH$	butan-1-thiol
$C_6H_5SeH$	benzosenol
$C(CH_2OH)_4$	2,2-bis(hydroxymethyl)propan-1,3-diol, pentaerythritol
$CCl_3CH(OH)_2$	2,2,2-trichlorethan-1,1-diol
$HOCH_2CH(NH_2)COOH$	2-amino-3-hydroxypropansyre, serin

Se også hemiketaleksemplet i 1.3.8.4.



quinolin-8-ol



2,3,4,6-tetrahydroxy-5H-benzo[7]annulen-5-on  
purpurogallin (triv.)



De traditionelle navne 8-hydroxyquinolin og oxin for den venstre forbindelse er begge uheldige, det første fordi hydroxygruppen er hovedfunktion og dog navngivet ved præfiks, det andet fordi det kunne tolkes som Hantzsch-Widman-navn (2.3.4.2) for pyran (tabel 6).

En række hydroxyforbindelser har hos IUPAC endnu anerkendte traditionelle navne:

Forbindelser af typen ROH, hvor R er en ikke-aromatisk hydrocarbylgruppe, kan generelt navngives med det radikofunktionelle suffiks 'alkohol':

ethylalkohol, *tert*-butylalkohol, cyclohexylalkohol

De aromatiske hydroxyforbindelser naphthalenol, phenanthrenol og anthracenol (alle navne dækker over flere isomerer) kan navngives som de forkortede versioner naphthol, phenanthrol og anthrol.

Yderligere en række forbindelser har accepterede egentlige trivialnavne, fx pentaerythritol (se ovenfor), picrinsyre (se 3.3.1.2), ethylenglycol, glycerol, pinacol, phenol, cresol, resorcinol. Se systematiske navne for disse i *Kemiske Ord*. Det eneste stamnavn blandt disse er phenol.

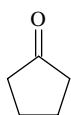
### 3.3.2.5. Oxoforbindelser (carbonylforbindelser): ketoner, quinoner, ketener, aldehyder og chalcogenanaloger dertil

Forbindelser indeholdende gruppen  $>C=O$  (en carbonylgruppe) bundet til mindst ét carbon kaldes i den organiske kemi oxoforbindelser eller carbonylforbindelser. (Præfikset 'carbonyl' betegner også liganden carbonmonoxid, jf. tabel 12.I.) Betegnelsen oxoforbindelse anvendes i øvrigt også bredere om forbindelser med oxygen bundet til andre grundstoffer end carbon, fx sulfoxider.

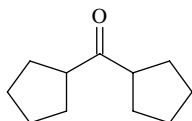
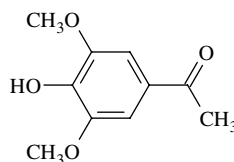
**Oxogruppen som hovedfunktion:** substitutivt, baseret på oxogruppen  $=O$ , får *ketoner* suffikset 'on' føjet til stamhydridets navn, *aldehyder* endelsen 'al'. Alternativt anvendes hhv. for ketoner radikofunktionel nomenklatur baseret på endelsen 'keton' (1.3.6.4) og for aldehyder RCHO endelsen 'carbaldehyd' føjet til navnet på stamforbindelsen RH. Suffikset 'al' kræver af gode grunde ikke nogen numerisk lokant.

$CH_3CH_2COCH_3$	butanon eller ethylmethylketon
$(CH_3)_2CHCH_2COCH_3$	isobutylmethylketon

(Bemærk, at det meget anvendte *akronym* MIBK for den sidste forbindelse er i strid med den alfabetiske rækkefølge af substituenterne).

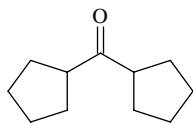


cyclopentanon

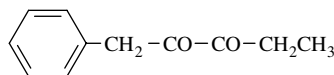
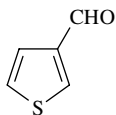
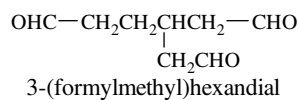
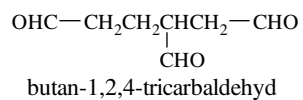
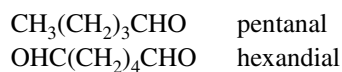
dicyclopentylmethanon  
(se også nedenfor)

1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)ethanon

(Bemærk her navnene methanon og ethanon, der ikke i sig selv betegner kemiske forbindelser).



dicyclopentylketon

1-phenylpentan-2,3-dion  
benzylethylidketon

thiophen-3-carbaldehyd

**Oxogruppen som underordnet substituent:** det generelle præfiks er 'oxo'.

$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{COOH}$	3-oxobutansyre
$\text{OHC}(\text{CH}_2)_2\text{CO}(\text{CH}_2)_3\text{CONH}_2$	5,8-dioxooctanamid

Substituentgrupper afledt af oxoforbindinger, således formyl,  $-\text{CHO}$ , er for en dels vedkommende navngivet i tabel 9; se også 2.5.3. Når en underforstået methylgruppe i et naturstof erstattes med gruppen  $-\text{CHO}$ , tilkendes dette også ved forstavelsen 'oxo' (se 3.11.5.1).

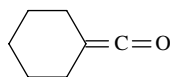
### Quinoner

Quinoner er diketoner afledt af mandede stamhydrider (2.3.2). De kan navngives som dioner eller quinoner, fx benzen-1,2-dion, dss. benzen-1,2-dion-quinon; jf. tabel 14A, hvori også er angivet godkendte, ikke helt systematiske, navne på enkelte quinoner.

### Ketener

Forbindelsen ethenon kaldes også keten. Derivater kan navngives ud fra keten som stamhydrid eller ved brug af substitutiv ketonnavngivning:

dibutylketen eller 2-butylnon-1-en-1-on



cyclohexylidenmethanon

### Bevarede ikke-systematiske navne for oxoforbindinger

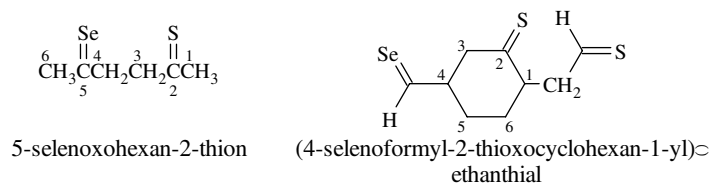
En række sådanne navne er givet i tabellerne 14A og 14B for forbindelser, der kan bruges som stamforbindinger. Yderligere ikke-systematiske, men IUPAC-ankendte navne må søges i *Kemiske Ord*.

Eksempel: i *Kemiske Ord* ses: **benzophenon**, dss. diphenylmethanon og diphenylketon. Indgangsordet bærer hverken betegnelsen (triv.) eller (foræ.). Dette betyder: benzophenon er IUPAC-acceptabelt, og de to næste er systemnavne for samme forbindelse.

### Chalcogenanaloger til oxoforbindinger

Svovl- og selenanaloger til oxoforbindinger navngives substitutivt ved brug af

- suffikserne ‘thion’ og ‘selon’ svarende til suffikset ‘on’
- suffikserne ‘thial’ og ‘selenal’ svarende til ‘al’
- suffikserne ‘carbothialdehyd’ og ‘carboselenaldehyd’ svarende til ‘carbaldehyd’
- præfikserne ‘thioformyl’ og ‘selenoformyl’ svarende til præfikset ‘formyl’
- præfikserne ‘thioxo’ og ‘selenoxo’ svarende til ‘oxo’
- infikserne ‘thiocarbonyl’ (eller ‘carbothioyl’) og ‘selenocarbonyl’ (eller ‘carboselenoyl’) svarende til ‘carbonyl’



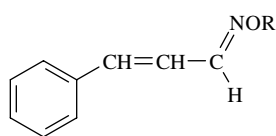
### 3.3.2.6. Nitrogenderivater af oxoforbindelser: oximer, hydrazoner, aziner, semicarbazoner mv.

I modsætning til hvad tilfældet var med iminer (3.3.2.3), foreslår IUPAC for nitrogenderivaterne i nærværende afsnit navne baseret på den tilsvarende oxoforbindelse:

benzaldehydoxim (tidligere benzaldoxim)

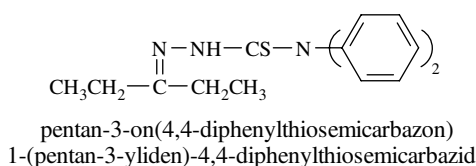
acetone[(2,4-dinitrophenyl)hydrazon] (alternativt 1-(2,4-dinitrophenyl)-2-isopropylidenhydrazin)

glucosephenylhydrazon



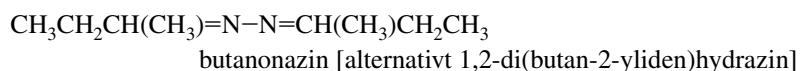
R = H: kanelaldehydoxim

R = C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>: kanelaldehyd-*O*-ethyloxim



Det sidste navn er et sædvanligt substitutivt navn ud fra thiosemicarbazid som stamforbindelse, jf. tabel 14C. Tilsvarende navne dannes ud fra navne-

ne semicarbazid, carbonohydrazid og carbazon (tabel 14C) samt chalconanaloger dertil såsom thiocarbonohydrazid.

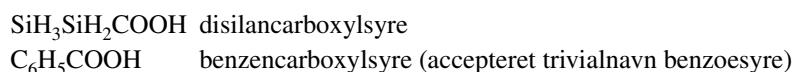


Symmetriske aziner med en højere prioriteret karakteristisk gruppe kan navngives ud fra principperne i 1.3.8.2 (se eksemplet ABTS dér).

### 3.3.2.7. Carboxylsyrer

#### *Carboxygruppen som hovedfunktion*

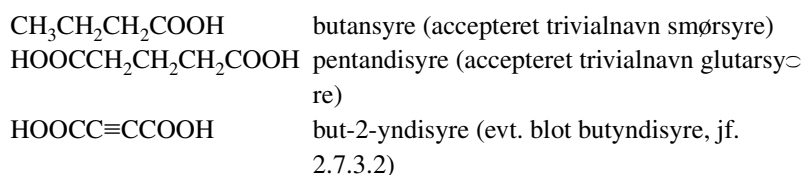
[a] Navngivning ud fra stamhydrid med suffikset 'carboxylsyre':



Ved tilstedeværelse af adskillige carboxygrupper anvendes det relevante numeriske præfiks fra tabel 2 (di-, tri- osv.):

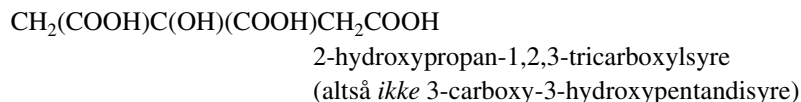


[b] Navngivning ud fra stamhydrid ved tilføjelse af endelsen 'syre':

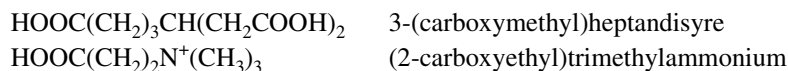


Denne form for navngivning er møntet på *acykliske uforgrenede* stamhydrider. Der er ved disse ikke behov for lokanter i forbindelse med endelsen 'syre'. I *steroidnomenklatur* (3.11.5.1) og *carotenoidnomenklatur* (3.11.5.3) tilføjes 'syre' med relevant *lokant*, når en methylgruppe, der er del af et stamhydrid, erstattes med en carboxygruppe. Fx olean-12-en-28-syre, jf. acaciesyre (triv.) i *Kemiske Ord* (oleanan: se tabel 5).

Er der flere end to carboxygrupper knyttet direkte til den uforgrenede kæde, anvendes den første metode, som eksempelvis for citronsyre:



**Navngivning med præfikse:** I andre situationer med to eller flere carboxygrupper, eller hvis der er en anden karakteristisk gruppe, der er hovedfunktion (jf. tabel 11), får man brug for præfikset ‘carboxy’:



**Konjunktiv nomenklatur:** En del vigtige oligocarboxylsyrer navngives lettest ved brug af konjunktiv nomenklatur; se eksempler i 1.3.6.2.

**Ikke-systematiske navne.** En række carboxylsyrer har traditionelle, ikke-systematiske navne (fx smørsyre, glutarsyre, citronsyre, se ovenfor), og en del af disse er accepteret som systemnavne (tabellerne 14B og 15).

For carboxylsyrer, der kan opfattes som afledt af dicarboxylsyrer med anerkendt ikke-systematisk navn ved udskiftning af den ene carboxygruppe med en aldehyd-, en amid- eller en anilid- (dvs. *N*-phenylamid-) gruppe tillades navne af typen ‘aldehydsyre’, ‘amidsyre’ og ‘anilidsyre’ dannet ud fra det anerkendte ikke-systematiske navn, til trods for, at dette er et brud på reglen om, at kun én type karakteristisk gruppe må angives ved suffiks (2.8.2). Altså eksempelvis phthalamidsyre, glutaraldehydsyre.

Forbindelser af denne art kan dog altid navngives helt systematisk ved brug af præfikser som ‘formyl’, ‘carbamoyl’, ‘*N*-phenylcarbamoyl’. Eksempler på de nævnte dobbelt-hovedfunktionsnavne er medtaget i *Kemiske Ord*.

### 3.3.2.8. Derivater af carboxylsyrer: anhydrider, halogenider, peroxo-syurer, amider, hydrazider og imider, lactamer, hydroxamsyurer, nitriler, amidiner mfl. samt chalcogenanaloger til visse af disse

En række forbindelser er traditionelt blevet klassificeret som derivater af carboxylsyrer, og der er i mange tilfælde også kemisk realitet bag denne klassifikation. Et navn som eddikesyreanhydrid fortæller direkte, hvorledes derivatet er opstået ud fra syren, og er dannet ud fra syrenavnet ved brug af den funktionelle modifikator ‘anhydrid’. Derivaterne, og endda carboxylsyrerne selv og deres chalcogenanaloger, kan imidlertid også beskrives som afledt af stamhydriderne vand (oxidant), hydrogenperoxid (dioxidant),

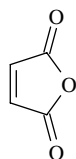
hydrogenchalcogeniderne (sulfan, selan og tellan), ammoniak (azan, amin) og hydrazin (diazan) ved substitution og navngives i overensstemmelse dermed, eller de kan i visse tilfælde navngives med binær nomenklatur.

Andre derivater af carboxylsyrer er *salte* og *estere*, men da disses nomenklatur er helt analog til nomenklatur for salte og estere af andre syrer, behandles den i hhv. 3.6 og 3.7.

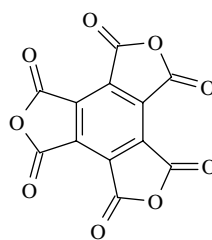
Nedenfor anføres et begrænset antal eksempler på navne på carboxylsyrederivater. tabel 14B angiver en række navne på carboxylsyrer, der kan optræde som stamforbindelser, samt på visse derivater af disse.

#### **Carboxylsyreanhydrider $R(C=O)O(C=O)R$ og chalcogenanaloger dertil**

$CH_3C(=O)OC(=O)CH_2CH_3$  eddikesyrepropionsyreanhydrid  
 $CH_3C(=O)SC(=O)CH_2CH_3$  eddikesyrepropionsyre-S-anhydrid, acetylpropionylsulfan



maleinsyreanhydrid  
2,5-dihydrofuran-2,5-dion



benzenhexacarboxylsyretrianhydrid  
dodecacarbonnonaoxid

#### **Carboxylsyrehalogenider $R(C=O)X$**

Navngives binært som acylhalogenider som eksemplificeret i 3.3.1.1.

#### **Peroxyssyrer $RC(=O)OOH$**

$Mg[o-C_6H_4(COO^-)C(=O)OOH]_2$  monoperoxyphthalsyremagnesiumsalt, magnesiumbis[2-(peroxycarboxy)benzoat]

$HC(=O)OOH$  permyresyre, dss. peroxymyresyre  
 $CH_3C(=O)OOH$  pereddikesyre, dss. peroxyeddikesyre  
 $C_6H_5C(=O)OOH$  perbenzoesyre, dss. peroxybenzoesyre og benzenperoxycarboxylsyre

De tre kortformer er IUPAC-accepterede navne.

**Amider, hydrazider, imider**

Amider kan grundlæggende navngives på to måder:

[a] Hvis den tilsvarende carboxylsyre er navngivet efter metode [a] i 3.3.2.7, erstattes 'carboxylsyre' med 'carboxamid':

$C_6H_5CONH_2$  benzencarboxamid (accepteret kortform benzamid)

[b] Ud fra et accepteret trivialnavn for carboxylsyren eller et navn for den dannet efter metode [b] i 3.3.2.7: endelsen 'syre' erstattes med 'amid', fx

ethanamid	$CH_3CONH_2$
heptandiamid	$H_2NCO(CH_2)_5CONH_2$
phthalamid	$o-C_6H_4(CONH_2)_2$

Substituerede amider  $RCO-NR'R''$  navngives ved brug af lokanten *N*- og/eller, i tilfælde af at  $R'$  og/eller  $R''$  er (substitueret) phenyl, som anilider:

$p-CH_3CH_2OC_6H_4NHCOCH_3$	<i>N</i> -(4-ethoxyphenyl)acetamid, 4'-ethoxyacetanilid
$C_6H_5CONHC_6H_5$	benzanilid, dss. benzencarboxanilid

Hydrazider, som er monoacylhydrazinforbindelser, følger hvad nomenklatur angår amiderne:

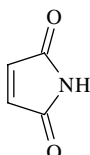
$CH_3CH_2CONHNH_2$	ethanhydrazid
$C_6H_5CONHNH_2$	benzencarbohydrazid (benzhydrazid)
$o-C_6H_4(CONHNH_2)_2$	benzen-1,2-dicarbohydrazid

Ved hydrazider af dicarboxylsyre kræver det omhu at undgå misforståelser; det netop anførte navn refererer til dihydrazidet af phthalsyre, mens phthalhydrazid (triv.) traditionelt betegner 1,2-phthaloylhydrazin, der også kan kaldes 1,2,3,4-tetrahydrophthalazin-1,4-dion (jf. tabel 7).

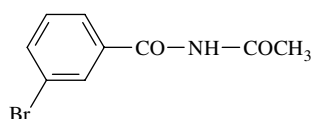
Cykliske imiders navne fremkommer af den tilsvarende dicarboxylsyres eventuelle anerkendte ikke-systematiske navn ved erstatning af 'syre' med 'imid' eller, i tilfælde af et disyrenavn med suffikset 'dicarboxylsyre', ved erstatning af dette med 'dicarboximid', altså phthalimid er synonymt



med benzendicarboximid. Acykliske imider og *N*-substituerede sådanne kan navngives som derivater af ammoniak (azan), dvs. man får diacetamylamin, tribenzoylazan osv.



maleinimid  
2,5-dihydropyrrol-2,5-dion



acetyl(3-brombenzoyl)amin  
*N*-acetyl-3-brombenzamid

### Hydroxamsyrer $R(C=O)NHOH$

Navngives som *N*-hydroxyamider, fx

$CH_3CONHOH$       *N*-hydroxyacetamid (tidligere acethydroxamsyre)

### Lactamer og lactimer

Intramolekylære amider, lactamer, som indeholder gruppen  $-CONH-$  som del af en ring, og deres tautomerer,  $-C(OH)=N-$  (lactimer), navngives fortrinsvis som heterocykler, fx efter Hantzsch-Widman-nomenklaturen (2.3.4.2). Når der ikke er højere prioriterede karakteristiske grupper i henhold til tabel 11, kan særlige navne med suffikserne 'lactam' og 'lactim' også benyttes, fx

hexano-6-lactam = azepan-2-on

hexano-5-lactam = azinan-2-on = 2-piperidon (jf. tabel 14A, fodnote 7)

Navne som  $\epsilon$ -caprolactam (for hexano-6-lactam), butyrolactim (for butano-4-lactim) mfl. anbefales ikke længere.

### Nitriler (cyanider), $RC\equiv N$

Nitriler kan navngives binært som cyanider, jf. 3.3.1.1 (altså fx ethylcyanid). Hvis der kun er karakteristiske grupper, som rangerer lavere end nitrilgruppen (se tabel 11) eller substituentgrupper fra 3.3.1, vil man oftest anvende et nitrilnavn:

bis(sulfanyl)butendinitril og 4-selenocyanato-1-naphthonitril, men cyane-  
ddikesyreethylester (ikke nitrilo-!)

$C_6H_5CN$                       benzonitril, dss. benzencarbonitril  
 $(NC)_2C=C(CN)_2$         tetracyanethen, dss. ethentetracarbonitril

**Imidsyrer,  $RC(=NH)OH$ , hydroximsyrer,  $RC(=NOH)OH$ , hydrazonsyrer,  $RC(=NNH_2)OH$**

Eksempler: butanimidsyre, acethydroximsyre, cyclopentancarbohydrazonsyre

**Amidiner,  $RC(=NH)NH_2$**

Eksempler på navngivning:

$(C_5H_4N)C(=NH)NH_2$         pyridincarboximidamid  
 $CH_3(CH_2)_4C(=NH)NH_2$     hexanimidamid

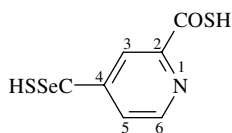
**Chalcogenanaloger til carboxylsyrer**

I en carboxygruppe  $-C(=O)OH$  kan et eller to oxygenatomer udskiftes med atomer af chalcogenerne S, Se og Te. Hvis der derved fremkommer en gruppe  $-CXYH$ , hvor X og Y er forskellige, er der to tautomere former,  $-C(=X)YH$  og  $-C(=Y)XH$ . Når der ikke er behov for at skelne mellem disse, er grundprincippet, at de nævnte substitutioner tilkendes

**enten** ved tilføjelse af præfikserne og infikserne 'thio', 'seleno' og 'telluro' til navnet for carboxyforbindelsen

**eller** ved anvendelse af præfikser som 'thiocarboxy', 'diselenocarboxy', 'selenothiocarboxy' osv. og suffikser af typen 'carbothiosyre', 'carbodiselenosyre', 'carbosenothiosyre' osv.

$CH_3COSeH$                       selenoeddikesyre, ethanselenosyre  
 $HCSSH$                             dithiomyresyre, methandithiosyre  
 $C_6H_5CSSeH$                     selenothiobenzoesyre, benzencarbosenothiosyre



4-(selenothiocarboxy)pyridin-2-carbothiosyre

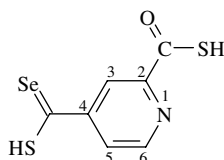
Ønsker man at skelne mellem de tautomere former, kan man i forbindelse med infikserne og suffikserne nævnt ovenfor tilføje *O*-, *S*-, *Se*- for at angive det atom, der bærer hydrogenet:

$\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{SeH}$	ethanseleno- <i>Se</i> -syre, evt. <i>Se</i> -selenoeddikesyre
$\text{CH}_3\text{C}(=\text{Se})\text{OH}$	ethanseleno- <i>O</i> -syre, evt. <i>O</i> -selenoeddikesyre
$\text{C}_6\text{H}_5\text{C}(=\text{S})\text{SeH}$	benzencarboselenothio- <i>Se</i> -syre

Når den chalcogensubstituerede carboxygruppe skal citeres ved præfiks, kan man bruge

‘hydroxy(thiocarbonyl)’ for  $\text{HO}-\text{C}(=\text{S})-$   
 ‘sulfanylcarbonyl’ for  $\text{HS}-\text{C}(=\text{O})-$   
 ‘selanyl(tellurocarbonyl)’ for  $\text{HSe}-\text{C}(=\text{Te})-$

og så fremdeles, altså eksempelvis (jf. ovenfor)

4-[sulfanyl(selenocarbonyl)]pyridin-2-carbothio-*S*-syre

I tilfælde af chalcogensubstitution i en dicarboxylsyre bliver der en række muligheder. Her er forslag til, hvordan substitution af et, to, tre og fire oxo- ygen med svovl i adipinsyre (hexandisyre) kan håndteres (i alle tilfælde navne, der ikke tager sigte på at skelne mellem tautomererne):

$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_4\text{COSH}$	monothioadipinsyre, 5-(thiocarboxy)pentansyre
$\text{HOOC}(\text{CH}_2)_4\text{CSSH}$	5-(dithiocarboxy)pentansyre
$\text{HSOC}(\text{CH}_2)_4\text{COSH}$	hexanbis(thiosyre)
$\text{HSSC}(\text{CH}_2)_4\text{COSH}$	trithioadipinsyre, 5-(dithiocarboxy)pentanthiosyre
$\text{HSSC}(\text{CH}_2)_4\text{CSSH}$	tetrathioadipinsyre, hexanbis(dithiosyre)

### 3.4. Uorganiske oxosyrer, dermed korresponderende anioner og afledte forbindelser

De uorganiske oxosyrer, syrer indeholdende én eller flere hydroxygrupper –OH bundet til et tredje grundstof (eksempelvis svovlsyre, salpetersyre), har traditionelt haft navne, der dels signalerede syreegenskaben, dels bar (delvis) information om oxidationstrin (salpetersyre versus salpetersyrning) og vandindhold, hhv. polymerisationsforhold (orthokiselsyre versus metakiselsyre, svovlsyre versus pyrosvovlsyre, periodsyre versus orthoperiodsyre).

Navnene har trods denne delvise systematik ikke været systematiske nok til, at man ud fra simple regler kunne slutte sig til den pågældende oxosyres struktur. Desuden anbefaler IUPAC generelt, at man bevæger sig væk fra nomenklatur baseret på kemiske egenskaber, her altså syreegenskaben (underforstået: i vand), og kun baserer navngivningen på struktur. Den konsekvente reaktion ville herefter være at forlade de traditionelle syrenavne helt og fx anvende koordinationsnomenklatur, som er let at konstruere og let at afkode for alle disse forbindelser (hexahydroxidotellur for orthotellursyre, dihydroxidodioxidossvovl for svovlsyre osv.).

Så drastisk er man dog ikke gået til værks (endnu); de vigtigste syrer har fået lov at beholde deres traditionelle navne, og til gengæld må man så i denne stofklasse finde sig i en blanding af nutidig systematisk nomenklatur og traditionel nomenklatur.

Bemærk, at *oxosyrer* i den organiske kemi har en anden betydning (forbindelser indeholdende en oxogruppe, fortrinsvis  $>C=O$ , ud over en syregruppe, fx en carboxygruppe).

#### 3.4.1. Bevarede traditionelle navne for oxosyrer og dermed korresponderende anioner

De endnu tilladte traditionelle navne fremgår af tabel 16.

Følgende navne på en række nitrogen-, phosphor- og arsensyrer (hvoraf ikke alle er nævnt i tabel 16) med hydrogen bundet direkte til N, hhv. P, hhv. As lægger IUPAC til grund for en række afledte navne (den *første* formel er i hvert tilfælde skrevet ligesom formlerne i tabel 16, dvs. hydrogen bundet til N, P eller As står lige *efter* disse, den anden er skrevet med disse hydrogenatomer *først*):

azinsyre (eng. azinic acid)	$\text{HNNH}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{N}(\text{O})\text{OH}$
azonsyre (eng. azonic acid)	$\text{H}_2\text{NHO}_3 = \text{HN}(\text{O})(\text{OH})_2$
phosphinsyring (eng. phosphinous acid)	$\text{HPH}_2\text{O} = \text{H}_2\text{P}(\text{OH})$
phosphinsyre (eng. phosphinic acid)	$\text{HPH}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{P}(\text{O})\text{OH}$
phosphonsyring (eng. phosphonous acid)	$\text{PH}(\text{OH})_2 = \text{HP}(\text{OH})_2$
phosphonsyre (eng. phosphonic acid)	$\text{H}_2\text{PHO}_3 = \text{HP}(\text{O})(\text{OH})_2$
arsinsyring (eng. arsenous acid)	$\text{HAsH}_2\text{O} = \text{H}_2\text{As}(\text{OH})$
arsinsyre (eng. arsenic acid)	$\text{HAsH}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{As}(\text{O})\text{OH}$
arsonsyring (eng. arsonous acid)	$\text{AsH}(\text{OH})_2 = \text{HAs}(\text{OH})_2$
arsonsyre (eng. arsonic acid)	$\text{H}_2\text{AsHO}_3 = \text{HAs}(\text{O})(\text{OH})_2$

(Se 3.4.3.2).

Tilsvarende kan en række navne på svovl- og selenforbindelser afledes af de formelle stamforbindelser

$\text{HS}(\text{O})\text{OH}$	sulfinsyre
$\text{HS}(\text{O})_2\text{OH}$	sulfonsyre
$\text{HSe}(\text{O})\text{OH}$	seleninsyre
$\text{HSe}(\text{O})_2\text{OH}$	selenonsyre

(Se 3.4.3.3.)

### 3.4.2. Systematiske navne for oxosyrer og dermed korresponderende anioner

#### Koordinationsnomenklatur

Såvel oxosyrerne som deres anioner kan navngives systematisk – og mange af dem navngives lettest systematisk – ved brug af koordinationsnomenklatur (se 1.3.6.5 og 3.9).

$\text{NO}_3^-$	trioxidonitrat(1–) (tilladt afkortet form: nitrat)
$\text{PHO}_3^{2-}$	hydridotrioxidophosphat(2–) (tilladt alternativ: fosfonat)
$(\text{OH})_2\text{OP}-\text{PO}(\text{OH})_2$	bis(dihydroxidooxidofosfor)( <i>P—P</i> ) tilladt traditionelt navn: hypofosphorsyre)
$(\text{OH})_2\text{P}-\text{O}-\text{PO}(\text{OH})_2$	tetrahydroxido-1 $\kappa^2$ O,2 $\kappa^2$ O- $\mu$ -oxido-(oxido-1 $\kappa$ O)diphosfor

$\text{SO}_3^{2-}$	trioxidosulfat(2-) (tilladt traditionelt navn: sulfid)
$\text{HSO}_3^- = [\text{SO}_2(\text{OH})]^-$	hydroxidodioxidosulfat(1-) (tilladt alternativt navn: hydrogensulfid, se nedenfor)
$\text{H}_2\text{SO}_3 = [\text{SO}(\text{OH})_2]$	dihydroxidooxidosvovl (tilladt traditionelt navn: svovlsyring)
$\text{SO}_5^{2-} = [\text{SO}_3(\text{OO})]^{2-}$	trioxidoperoxidosulfat(2-) (tilladt alternativt navn: peroxydisulfat, jf. 1.3.8.4)
$\text{S}_2\text{O}_8^{2-} = [\text{O}_3\text{SOOSO}_3]^{2-}$	$\mu$ -peroxido-bis(trioxidosulfat)(2-) (tilladt alternativt navn: peroxydisulfat, jf. 1.3.8.4)
$\text{Te}(\text{OH})_6$	hexahydroxidotellur (tilladt traditionelt navn: orthotellursyre)

Fleere eksempler kan findes i tabellerne 16 og 17.

#### »Hydrogennavne«

Diverse hydroniserede former af anionerne – herunder oxosyrerne selv – kan gives »hydrogennavne« (se [3b], IR-8.4 og IR-8.5):

$\text{HNO}_3$	hydrogen(trioxidonitrat) (tilladt traditionelt navn: salpetersyre)
$\text{H}_2\text{PHO}_3$	dihydrogen(hydridotrioxidophosphat) (tilladt alternativt navn: phosphonsyre, jf. 3.4.1)
$\text{HSO}_3^-$	hydrogen(trioxidosulfat)(1-) (tilladt kortform: hydrogensulfid)
$\text{H}_2\text{NO}_3^+$	dihydrogen (trioxidonitrat)(1+)

Det er navnlig de tilladte kortformer hydrogensulfid, hydrogencarbonat mfl., der har interesse. Alle sådanne uorganiske navne er medtaget i *kemiske ord*. Konstruktionen er generel for polyvalente organiske syrer, jf. 3.6.

### 3.4.3. Navne på derivater af oxosyrerne

#### 3.4.3.1. Amider, halogenider mv.

Substitution af hydroxy- eller oxogrupper i oxosyrer med elektronegative substituentgrupper som fx  $-\text{NH}_2$  eller  $-\text{Cl}$  eller alkoxygrupper fører til forbindelser, der fremdeles kan navngives ved koordinationsnomenklatur (1.3.6.5), altså fx

$B(OCH_3)_3$	trimethoxidobor
$NOCl$	chloridooxidnitrogen
$FPO(OH)_2$	fluoridodihydroxidooxidophosphor
$POBr_3$	tribromidooxidophosphor
$HOSO_2NH_2$	amidohydroxidodioxidosvovl
$SO_2(NH_2)_2$	diamidodioxidosvovl
$SOCl_2$	dichloridooxidovovl

(For de anvendte ligandpræfikser, se tabel 12.I.)

Med samme overskuelighed og samme grad af systematik kan man konstruere substitutive navne baseret på stamhydrider (1.3.8.1); ovennævnte forbindelser ville herved få navne som

$NOCl$	chloroxoazan
$FPO(OH)_2$	fluordihydroxyoxo- $\lambda^5$ -fosphan
$SO_2(NH_2)_2$	diaminodioxo- $\lambda^6$ -sulfan
$SOCl_2$	dichloroxo- $\lambda^4$ -sulfan
	osv.

(For de anvendte præfikser se tabellerne 10 og 11, for de anvendte stamhydrnavne se tabel 3.)

IUPAC lægger klart op til, at disse navnetyper skal fremmes, ikke mindst koordinationsstypen. Der er dog mere traditionelle alternativer, som stadig tolereres i nogen grad.

For derivater uden hydroxygrupper (altså hvori alle traditionelle syrehydrogenatomer er substitueret) kan gives *binære* navne (jf. 1.3.6.3), der i denne sammenhæng også kan klassificeres som *radikofunktionelle* (1.3.6.4), eksempelvis:

$COCl_2$	carbonyldichlorid (eller blot carbonylchlorid)
$NOCl$	nitrosylchlorid
$POBr_3$	phosphoryltribromid (eller blot phosphorylbromid)
$SO_2(NH_2)_2$	sulfuryldiamid eller sulfonyldiamid
$SOCl_2$	thionylchlorid eller sulfinylchlorid

(Der anvendes her substituentgruppenavne fra tabel 9.)

Yderligere muligheder for at navngive *estere*, som fx  $B(OCH_3)_3$  fra før, er diskuteret i 3.7.

Derivater, der endnu har nogle af den oprindelige oxosyres syrehydrogenatomer tilbage, kan naturligvis gives »hydrogennavne« (3.4.2), altså fx

$\text{HOSO}_2\text{NH}_2$  hydrogen(amidotrioxidosulfat)

En mere speciel, men etableret, navngivning for netop disse forbindelser benytter de i 1.3.8.4 indførte præfikser og infikser, således at man får

$\text{FPO}(\text{OH})_2$  fluorphosphorsyre eller phosphorfluoridsyre  
 $\text{P}(\text{OH})\text{S}(\text{SH})_2$  trithiophosphor-*O,S,S*-syre eller phosphortrithio-*O,S,S*-syre  
 $\text{PHS}(\text{SH})_2$  trithiophosphonsyre eller phosphontrithiosyre  
 $\text{AsH}_2(=\text{NH})\text{CN}$  cyanimidoarsinsyre eller arsincyanoimid(syre)

IUPAC sanktionerer endnu disse konstruktioner for phosphor- og arsensyrenes vedkommende. Lignende konstruktioner findes også i navne for afledninger af sulfon- og sulfinsyre (3.4.3.3).

#### 3.4.3.2. Organiske derivater af nitrogen-, phosphor- og arsenoxosyrer med C-N-, hhv. C-P- og C-As-bindinger

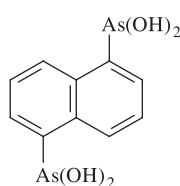
I de oxosyrer af nitrogen, phosphor og arsen, der har hydrogen bundet direkte til N hhv. P hhv. As (dvs. de i slutningen af 3.4.1 nævnte syrer samt derivater heraf fremkommet ved substitution som beskrevet sidst i 3.4.3.1), kan sådanne hydrogenatomer substitueres med alkyl- eller arylgrupper. Herved fremkommer organiske forbindelser, der benævnes phosphinsyrer, phosphonsyrer, arsinsyrer osv. De indtrædende organiske grupper benævnes ved substituentgruppenavne som de i tabel 8 anførte; disse alfabetiseres på lige fod med eventuelle præfikser, som tilkendegiver substitution af  $-\text{OH}$  og  $=\text{O}$ .

$\text{CH}_2=\text{N}(\text{O})\text{OH}$  methylenazinsyre (tidligere *aci*-nitromethan)  
 $\text{CH}_3\text{PF}(\text{O})\text{OH}$  fluormethylphosphonsyre eller methylphosphonfluoridsyre  
 $\text{CH}_3\text{PNH}_2(\text{O})\text{OH}$  amido(methyl)phosphonsyre eller methylphosphonamidsyre  
 $(\text{CH}_3\text{NH}_2)\text{PO}(\text{OH})_2$  (methylamido)phosphorsyre eller phosphor(methylamid)syre



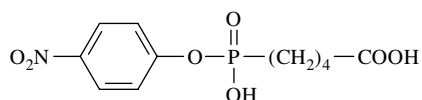
$(\text{H}_2\text{O}_3\text{PCH}_2)_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_2\text{PO}_3\text{H}_2)_2$  ethylendiamintetrakis(methylen)tetrakis(phosphonsyre) (akronym EDTMP eller EDTMPA)

Som ved de uorganiske derivater kan også koordinationsnomenklatur anvendes, eksemplificeret ved det andet navn nedenfor:



naphthalen-1,5-diyl-diarsonsyring  
 $\mu$ -naphthalen-1,5-diyl-bis(dihydroxidoarsen)

Hvis den organiske substituent indholder en karakteristisk gruppe, der har prioritet over nitrogen- eller phosphoroxosyregruppen, må sidstnævnte angives ved præfiks, og man udsøger sig da det relevante præfiks i tabel 9.



5-[hydroxy(4-nitrophenoxy)phosphoryl]pentansyre

$m\text{-(H}_2\text{O}_3\text{P)(C}_6\text{H}_4\text{)COOH}$  3-phosphonobenzoesyre

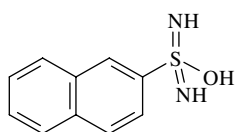
### 3.4.3.3. Sulfon-, sulfin-, selenon- og seleninsyrer og beslægtede forbindelser

I modsætning til ved phosphor- og arsenforbindelserne anvendes ved substitution med alkyl- og arylgrupper i de formelle stamforbindelser sulfonsyre, sulfinsyre og sulfensyre og i de tilsvarende selenforbindelser (se sidst i 3.4.1) *substitutiv nomenklatur baseret på stamhydridet svarende til den organiske substituentgruppe*, således at man får

$\text{C}_6\text{H}_5\text{SeO}_3\text{H}$  benzenselenonsyre  
 $p\text{-H}_2\text{NC}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{H}$  4-aminobenzensulfonsyre  
 (tilladt trivialnavn: sulfanilsyre)

$\text{H}_2\text{N}(\text{HN}=\text{C})\text{SO}(\text{OH})$  aminoiminomethansulfinsyre  
[formamidinsulfinsyre (triv.)]

En del derivater af sulfonsyrer og sulfinsyrer (og tilsvarende selenforbindelser) navngives ved anvendelse af de ovenfor diskuterede præfikser og infikser for substitution af hydroxy- og oxogrupper; dog er systematikken ikke gennemført, da der snart anvendes præfikser, snart infikser. Der henvises til IUPAC for en fortegnelse over sådanne derivatnavne [2, s. 114].



naphthalen-2-sulfondiimidsyre

$\text{R-S}(=\text{NH})(=\text{S})\text{OH}$  en thiosulfonimid-*O*-syre

Navne for *estere* af disse svovl- og selenbaserede syrer, herunder *sultoner*, fremgår af 3.7.

#### **Anhydrider**

Navngivningen af anhydrider dannet ud fra sulfonsyrer er helt analog til den fra carboxylsyreanhydriderne kendte (3.3.2.8); man får således

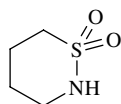
$(\text{C}_6\text{H}_5\text{SO}_2)_2\text{O}$  benzensulfonsyreanhydrid eller bis(benzensulfonyl)oxidan eller bis(phenylsulfonyl)oxidan (jf. 2.5.2)

#### **Sulfonamider og sultamer**

Substitution i sulfonsyrer af  $-\text{OH}$  med  $-\text{NH}_2$  fører til *sulfonamider*, eksempelvis:

$p\text{-H}_2\text{NC}_6\text{H}_4\text{SO}_2\text{NH}_2$  4-aminobenzensulfonamid (anbefalet kortform af ...sulfonylamid)

Substitueres internt i molekylet, fås en *sultam* (et cyklisk sulfonamid); sådanne navngives enten som heterocykler eller ved suffikset 'sultam', eksempelvis:



butan-1,4-sultam  
1,2-thiazinan-1,1-dioxid

## 3.5. Ioner og radikaler

En række af de vigtigste simple ioner og radikaler er navngivet i tabel 17. Vi skal her blot kort omtale nogle generelle principper; mere fuldstændige fremstillinger må søges i [2, 3b, 4]. I tabel 17 er dels anført navne dannet ud fra disse principper, dels anerkendte halvsystematiske navne eller trivialnavne.

### 3.5.1. Anioner

Homoatomige anioners navne dannes ved modifikation af grundstoffets navn med endelsen 'id' i henhold til tabel 1, fodnote 1, altså

$\text{Au}^-$	aurid(1-)
$\text{P}^{3-}$	phosphid(3-), eller kort phosphid
$\text{N}^{3-}$	nitrid
$\text{C}_2^{2-}$	dicarbid(2-)
$\text{N}_3^-$	trinitrid(1-)

Anioner dannet fra stamhydrider ved fraspaltning af hydroner navngives ligeledes med endelsen 'id', her forsynet med multiplikativt præfiks og lokanter hvis relevant:

$\text{C}_2\text{H}_5^-$	ethanid
$\text{C}_2^{2-}$	ethyndiid
$\text{C}_5\text{H}_5^-$	cyclopentadienid (kort form af cyclopenta-2,4-dien-1-id)
$\text{S}_2^{2-}$	disulfandiid
$\text{H}_2\text{NN}^{2-}$	hydrazin-1,1-diid

Anioner dannet ved addition af hydrid til et stamhydrid navngives med endelsen 'uid', fx  $\text{PH}_4^-$ , fosphanuid.

Anioner, der er korresponderende baser til uorganiske oxosyrer, har etablerede navne, der ender på 'at', i enkelte tilfælde 'it', fx  $\text{NO}_3^-$ , nitrat;  $\text{NO}_2^-$ , nitrit. Flere eksempler af denne art findes i tabel 16 og 17 og i *Kemiske Ord*.

Anionnavne i øvrigt ender på 'at':

*kompleksanioner*, fx  $\text{AsS}_4^{3-}$ , tetrasulfidoarsenat(3-);  $\text{IrCl}_6^{2-}$ , hexachloridoiridat(2-);  $\text{NCN}^{2-}$ , dinitridocarbonat(2-)

*alkoholationer* og *phenolationer*, fx  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{O}^-$ , butan-2-olat;  $2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{O}^-$ , 2-naphtholat (= naphthalen-2-olat)

*carboxylationer*, fx  $^-\text{OOC}(\text{CH}_2)_3\text{COO}^-$ , pentandioat;  $2\text{-(C}_4\text{H}_3\text{Se)COO}^-$ , selenophen-2-carboxylat

I kompleksanionnavnene anvendes centralatomnavnet modificeret i henhold til tabel 1.

### 3.5.2. Kationer

Den generelle endelse for kationnavne er 'ium'. Tilføjelse af 'ium', hhv. 'ylium' til navne på stamforbindelser betegner addition af  $\text{H}^+$ , hhv. fjernelse af  $\text{H}^-$ . Disse endelser ledsages om fornødent af lokanter og multiplikative præfikser.

$\text{NH}_4^+$	azanium, ammonium
$\text{C}_6\text{H}_7^+$	benzenium
$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}^+\equiv\text{N}$	phenyldiazenylium, benzendiazonium
$\text{C}_3\text{H}_7^+$	propylium (foretrukken kort form af propan-1-ylium)
$\text{HS}^+$	sulfanylium
$\text{CH}_3\text{CO}^+$	1-oxoethylium, acetylium
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{NH}_3^+)\text{COOH}$	valinium (valin, se tabel 15)
4,4'-bipyridin-1,1'-diiium	(se tabel 2 i 5.2.5)

En del kationer har afkortede navne eller trivialnavne: ammonium (se ovenfor); oxonium (=oxidanium); pyrylium (afkorting af 2H-pyran-2-ylium); flavylium mfl. (se *Kemiske Ord*).

Grundstofnavne modificeres ikke, men forsynes evt. med ladningstal:  $\text{Ca}^{2+}$ , calcium(2+);  $\text{Cr}^{3+}$ , chrom(3+).

To måder at navngive betain (triv.) på viser, hvordan substituerede ammoniumioner kan behandles som substituentgrupper:

$(\text{CH}_3)_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{COO}^-$  (trimethylammonio)ethanoat,  
eller 3,3-dimethyl-3-azoniobutanoat

### 3.5.3. Radikaler

Den generelle endelse er 'yl' ligesom ved substituentgrupper (2.4, 2.5); er der behov for at angive radikaler med præfiks, bruges 'ylo'. Se tabel 11, fodnote 2 samt tabel 17 for eksempler.

### 3.5.4. Zwitterioner og radikalioner

Suffikserne 'id', 'uid', 'ium', 'ylium' og 'yl' kan kombineres og anføres i rækkefølgen ium/ylium/id/uid/yl, fx

$\text{C}_6\text{H}_6^{+\cdot}$	benzeniumyl
$(\text{CH}_3)_3\text{N}^+-\text{N}^--\text{CH}_3$	1,2,2,2-tetramethyldiazan-2-ium-1-id
$^-\text{CH}_2\text{CH}_2\cdot$	ethan-2-id-1-yl
$\text{C}_{10}\text{H}_8^{+\cdot}$	naphthalenuidyl

uden at dette opfattes som stridende mod reglen om kun at angive én type karakteristisk gruppe med suffiks.

Andre eksempler på zwitterioner: se betain (3.5.2) og aminosyrezwitterioner (3.11.1.1).

## 3.6. Salte

Saltnavne er binære navne (1.3.6.3) dannet ud fra kation- og anionnavne (3.5), altså fx benzendiazoniumtetrafluoridoborat.

De »sure« salte af polyvalente syrer navngives med præfikset 'hydrogen' foran anionnavnet, evt. med multipikativt præfiks, altså

kaliumhydrogentartrat	$\text{K}^+[\text{HOOCCHOHCHOHCOO}]^-$
natriumdihydrogenphosphat	$\text{NaH}_2\text{PO}_4$

eller ved brug af substitutiv nomenklatur [kalium(3-carboxy-2,3-dihydroxypropanoat)] eller koordinationsnomenklatur [natriumdihydroxidodioxidophosphat (1-)]. Navne af typen vinsyremonokaliumsalt er også mulige (jf. 3.4.2).

Salte af aminer med hydrogenhalogenider kan navngives som ammoniumsalte, fx

$(C_4H_9)_3NH^+I^-$  tributylammoniumiodid

eller som hydrohalogenider, fx

morphinhydrochlorid (morphin, se *Kemiske Ord*)  
 $C_6H_5NH_3^+Br^-$  aniliniumbromid eller anilinhydrobromid

Dobbeltsalte kan navngives som additionsforbindelser, se 3.8.

## 3.7. Estere af uorganiske og organiske syrer

Estere dannes formelt ved vandfraspaltning mellem en syre og en hydroxyforbindelse (alkohol, phenol). Syren kan være en uorganisk oxosyre (3.4) eller en deraf afledt syre, fx en sulfonsyre (3.4.3.3), eller en carboxylsyre (3.3.2.7) eller en chalcogenanalog dertil (3.3.2.8).

Der er tre hovedmåder at navngive estere på, som beskrives i 3.7.1, 3.7.2 og 3.7.3.

### 3.7.1. Radikofunktionel nomenklatur

(Jf. 1.3.6.4). Princippet er her, at syrens navn efterfølges af navnet på den til hydroxyforbindelsen svarende substituentgruppe – om fornødent forsynet med et multiplikativt præfiks (tabel 2) – hvorefter det samlede navn afsluttes med suffikset 'ester'.

$CH_3CH_2COO(t-Bu)$  propionsyre(*tert*-butyl)ester  
 $o-C_6H_4(COOH)COOCH_3$  phthalsyremonomethylester  
 $o-C_6H_4[COOCH_2CH(C_2H_5)CH_2CH_2CH_2CH_3]_2$   
 phthalsyrebis(2-ethylhexyl)ester

$\text{PF}(\text{O})[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]_2$	fluorphosphorsyrediisopropylester
$\text{B}(\text{OCH}_3)_3$	borsyretrimethylester

Ved syrer med flere esterificerbare grupper kan det være nødvendigt med lokanter for at specificere strukturen fuldstændigt:

$\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{SeCH}_3$	selenoeddikesyre- <i>Se</i> -methylester, ethanselenosyre- $\ominus$ <i>Se</i> -methylester
$\text{CH}_3\text{C}(\text{Se})\text{OCH}_3$	selenoeddikesyre- <i>O</i> -methylester, ethanselenosyre- $\ominus$ <i>O</i> -methylester
$\text{P}(\text{S})(\text{OC}_2\text{H}_5)(\text{SC}_2\text{H}_5)[p\text{-}[\text{OC}_6\text{H}_4(\text{SCH}_3)]]$	dithiophosphorsyre- <i>O</i> -ethyl- $\ominus$ <i>S</i> -ethyl- <i>O'</i> -[4-(methylsulfanyl)phenyl]ester
$\text{CH}_3\text{OC}(\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$	glutaminsyre( <i>O</i> <sup>5</sup> -methyl)ester, 2- $\ominus$ amino-4-(methoxycarbonyl)butansyre (jf. 3.7.4)

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

#### 3.7.2.1. Sædvanlige binære esternavne

(Jf. 1.3.6.3). Her begynder navnet med substituentgruppenavnet svarende til hydroxyforbindelsen (den formelt positive del), igen om fornødent med multiplikativt præfiks, efterfulgt af saltnavnet svarende til syren (navnet på den til syren korresponderende anion), ligeledes eventuelt med multiplikativt præfiks:

$\text{PF}(\text{O})[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]_2$	diisopropylfluorphosphat
$\text{CH}_3\text{PF}(\text{O})[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]$	isopropyl(methylphosphonfluoridat) (jf. 3.4.3.2)
$\text{B}(\text{OCH}_3)_3$	trimethylborat
$\text{P}(\text{OC}_6\text{H}_5)_3$	triphenylphosphit
$o\text{-C}_6\text{H}_4(\text{COOH})\text{COOCH}_3$	methylhydrogenphthalat
$o\text{-C}_6\text{H}_4[\text{COOCH}_2\text{CH}(\text{C}_2\text{H}_5)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3]_2$	bis(2-ethylhexyl)phthalat
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}(\text{OOCCH}_3)_2$	benzylidendiacetat (jf. tabel 8, fodnote 11)

Ved syrer med flere esterificerbare grupper kan det igen være nødvendigt med lokanter for at specificere strukturen fuldstændigt:

$\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{SeCH}_3$	<i>Se</i> -methyl(ethanselenoat)
$\text{CH}_3\text{C}(\text{Se})\text{OCH}_3$	<i>O</i> -methyl(ethanselenoat)

$P(S)(OC_2H_5)(SC_2H_5)[p-[OC_6H_4(SCH_3)]]$  *O*-ethyl-*S*-ethyl-*O*'-[4-(methylsulfanyl)phenyl]dithiophosphat

### 3.7.2.2. Varianter: navne baseret direkte på hydroxyforbindelsens navn

For oligohydroxyforbindelser med accepterede ikke-systematiske navne tillades »saltagtige« esternavne konstrueret ud fra selve hydroxyforbindelsens navn, fx

glyceroltristearat [systematisk propan-1,2,3-triyltris(octadecanoat)]

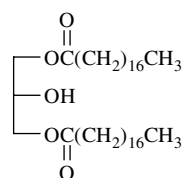
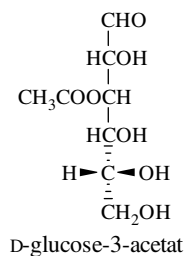
glucosepentaacetat

pentaerythritoltetranitrat

Navne for polyacylerede polyhydroxyforbindelser såsom celluloseacetat og distivelseadipat er af samme type, men er ikke entydige, da forestringsgraden ikke specificeres.

Ved kun delvis forestrede oligohydroxyforbindelser er lokanter ofte nødvendige for at specificere strukturen, fx

adenosin-5'-tetrahydrogentriphosphat (jf. 3.11.3)



glycerol-1,3-distearat  
1,3-di-*O*-stearoylglycerol  
2-hydroxypropan-1,3-diylldistearat

Bemærk det alternative navn med konstruktionen '*O*-acyl'. Tilsvarende navne tillades også i carbohydratnomenklaturen (3.11.2.4).

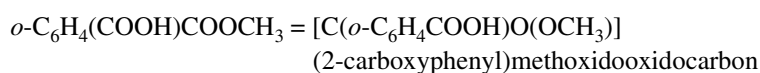


### 3.7.3. Koordinationsnomenklatur

Som for andre stofklasser ser IUPAC gerne denne gennemskuelige nomenklaturtype (jf. 1.3.6.5) yderligere udbredt. Eksempler (jf. ovenfor):

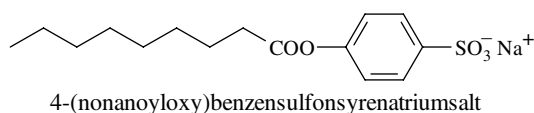
$\text{PF}(\text{O})[\text{OCH}(\text{CH}_3)_2]_2$	fluoridooxidobis(propan-2-olato)phosphor
$\text{B}(\text{OCH}_3)_3$	trimethoxidobor
$\text{P}(\text{OC}_6\text{H}_5)_3$	tris(phenolato)phosphor
$[\text{P}(\text{OC}_2\text{H}_5)[p\text{-}[\text{OC}_6\text{H}_4(\text{SCH}_3)]]\text{S}(\text{SC}_2\text{H}_5)]$	(ethanthiolato)ethoxido[4-(methylsulfanyl)phenolato]sulfidophosphor

Til carboxylsyreestere er koordinationsnomenklatur ikke meget anvendt, men der er intet til hinder for at gøre det; for methylhydrogenphthalat fra før fås:



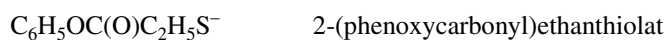
### 3.7.4. Estergrupper navngivet med præfiks

Hvis en ester indeholder en gruppe, der er højere prioriteret end estergruppen if. tabel 11, navngives den i almindelighed substitutivt for så vidt angår estergruppen, dvs. denne specificeres ved et præfiks, *enten* af typen 'acyloxy', fx



og, for methylhydrogenphthalat fra før, 2-(methoxycarbonyl)benzoesyre

eller af typen 'alkoxycarbonyl', fx



Se også glutaminsyremethylestereksemplet i 3.7.1.

### 3.7.5. Cykliske estere: lactoner og sultoner

Som tilfældet var med lactamer (3.3.2.8) og sultamer (3.4.3.3), kan intramolekylære estere af hhv. carboxylsyrer og sulfonsyrer, dvs. ringforbindelser indeholdende grupperne  $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ , hhv.  $-\text{S}(=\text{O})_2\text{O}-$ , navngives som lactoner, hhv. sultoner, hvis der ikke er højere prioriterede karakteristiske grupper (tabel 11). Alternativt kan sådanne estere navngives som heterocykliske forbindelser. Eksempler:

L-xylo-2-hexulosono-1,4-lacton, ascorbinsyre (triv.) (jf. 3.11.2.2)  
 butano-4-lacton, dss. tetrahydrofuran-2-on  
 naphthalen-1,8-carbolacton, dss. naphthalen[1,8-*bc*]furan-2-on (jf. 2.3.5.2)  
 og 1(2*H*)-oxaacenaphthylen-2-on  
 hexan-2,5-sulton, dss. 3,6-dimethyl-1,2-oxathian-2,2-dioxid (jf. 2.3.4.2 og 3.3.2.1)

Det forekommer logisk at konstruere *sultinnavne* for de tilsvarende cykliske forbindelser  $-\text{S}(=\text{O})\text{O}-$  afledt af sulfinsyrer. Sådanne omtales dog ikke i [1,2].

## 3.8. Additionsforbindelser

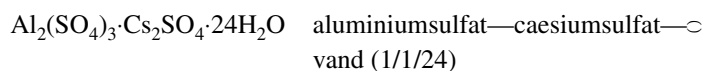
Egentlige additionsforbindelser, fx clathrater, navngives ved additionsnomenklatur (1.3.6.1).

Endelser som ammoniakat, etherat osv. anbefales ikke; i stedet bruges også for disse traditionelle »solvater« additionsnavne:

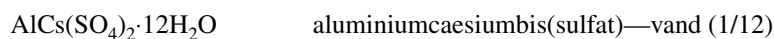
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}\cdot\text{BF}_3$	bortrifluorid—diethylether (1/1)
$\text{CaCl}_2\cdot 8\text{NH}_3$	calciumchlorid—ammoniak (1/8)
$\text{CaSO}_4\cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$	calciumsulfat—vand (2/1)
$3\text{CdSO}_4\cdot 8\text{H}_2\text{O}$	cadmiumsulfat—vand (3/8)

Begrundelsen er, at 'at' betegner en anion (se 3.5.1). Der ville klart opstå problemer ved brug af fx 'ethanolat'. Navne af typen 'natriumsulfat- $\infty$  decahydrat', der ikke kan misforstås, tolereres dog stadig.

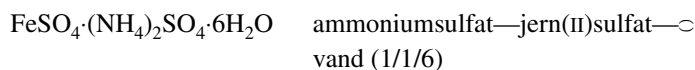
Dobbeltsalte navngives bekvemt ved brug af additionsnomenklatur kombineret med binær nomenklatur (1.3.6.3), fx for caesiumalun (triv.):



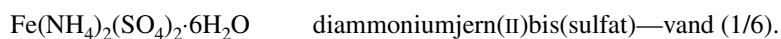
eller



I tilfældet Mohrs salt (triv.) får man tilsvarende



eller



### 3.9. Koordinationsforbindelser, herunder flerkernede sådanne

Den grundlæggende koordinationsnomenklatur forklaret i 1.3.6.5 giver navne, der formidler forbindelsens støkiometri og strengt taget ikke meget andet. Vi skal her se på, hvorledes disse navne kan udbygges til også at informere om strukturelle forhold, herunder for forbindelser med flere centralatomer. Bagved ligger fortsat en opfattelse af *koordinationsforbindelser* i ordets bredeste forstand, så der ikke blot er tale om klassiske metalkomplekser, men også fx om metalorganiske forbindelser og en række molekylære forbindelser af hovedgruppegrundstofferne såsom oxosyrer og afledte forbindelser.

Koordinationsnomenklaturen for komplicerede metalkomplekser er stadig under udvikling hos IUPAC; vi indskrænker os her til at diskutere simple systemer og henviser for flere detaljer til [3b, IR-9 og IR-10] og referencer deri. De få koordinationsnavne for egentligt *polymere* forbindelser, som vi kan komme ind på i denne bog, er eksemplificeret i 3.10.1.

Bemærk, at flere af eksemplerne i nærværende afsnit er taget op flere gange for at demonstrere navngivning på forskellige niveauer af detaljering med hensyn til struktur og oxidationstrin.

### 3.9.1. Grundkomponenter af koordinationsnavne

#### 3.9.1.1. Centralatom- og ligandbetegnelser, ladningstal

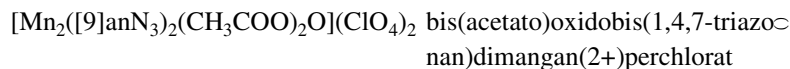
Vi har allerede omtalt *centralatomnavnene* og deres eventuelt modificerede form i afsnit 1.3.6.5, og *ligandpræfikser* er diskuteret i 2.6. Det (eller de) førromtalte rent støkiometriske koordinationsnavne sammensættes af sådanne ligand- og centralatombetegnelser forsynet med relevante *multiplikative præfikser* (tabel 2) samt, om fornødent, et *ladningstal* (tidligere også kaldet *Ewens-Bassett-tallet*) i parentes efter selve navnet. I mange tilfælde er et støkiometrisk koordinationsnavn tilstrækkeligt til at identificere forbindelsen, fx

$B(OCH_3)_3$	trimethoxidobor eller tris(methanolato)bor
$AsS_4^{3-}$	tetrasulfidoarsenat(3-)
$[CoCl(NH_3)_5]Cl_2$	pentaamminchloridocobalt(2+)dichlorid (eller blot -chlorid)
$[Fe(CO)_4]^{2-}$	tetracarbonylferrat(2-)
$[FeCp_2] = [Fe(C_5H_5)_2]$	bis(cyclopentadienyl)jern (se også 3.9.1.2, 3.9.2.3)

#### 3.9.1.2. Oxidationstrinsangivelse

Hvis det ønskes, kan man tilkendegive oxidationstrin af centralatomer i koordinationsforbindelser eksplicit ved hjælp af *Stock-tal*, romertal i parentes efter centralatombetegnelsen. Ladningstal og Stock-tal er ofte komplementære, dvs. man kan slutte fra det ene til det andet og behøver i disse tilfælde derfor kun det ene af dem i et navn. IUPAC har i [3b] klart bevæget sig i retning af at foretrække ladningstal, når ikke noget særligt taler for Stock-tal.

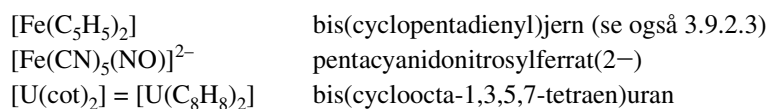
$AsS_4^{3-}$	tetrasulfidoarsenat(V)
$[CoCl(NH_3)_5]Cl_2$	pentaamminchloridocobalt(III)dichlorid (eller blot 'chlorid')
$[Fe(CO)_4]^{2-}$	tetracarbonylferrat(-II)



I de tre første eksempler er ladningstallet, som vi opskrev i forrige afsnit, tilstrækkeligt til at fastlægge det konventionelle oxidationstrin for centralatomet. I det sidste eksempel er flere mulige kombinationer af mangans konventionelle oxidationstrin forenelige med kompleksionens totalldning. Ønsker man at tilkendegive, at man regner med to mangan(III)-centre, kan man skrive

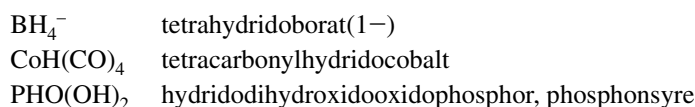


Koordinationsforbindelser af visse ligander navngives konventionelt ud fra de uladede ligandmolekyler, uanset at elektroniske forhold måske undertiden snarere svarer til, at der er overført ladninger til eller fra centralatomet; man navngiver således



og implicerer altså hhv. jern(0), jern(III) og uran(0).

Hydrogenatomer bundet til centralatomer regnes til gengæld konventionelt som hydridligander i koordinationsnomenklatur, således at man altså får



med implicerede oxidationstrin III for bor, I for cobalt og V for phosphor. Disse implikationer kan måske umiddelbart forbavse, fx hvis man ellers regner bors oxidationstrin som -III i  $\text{BH}_3$  eller phosphors som III i phosphorsyre (som jo har samme bruttoformel som  $\text{P}(\text{OH})_3$ , hvori phosphor klart konventionelt ville blive tildelt oxidationstrinnet III).

Der er altså tilfælde med usikkerhed omkring oxidationstrinstildelingen, og i disse tilfælde kan det ikke anbefales at anvende oxidationstrin til (indirekte) specifikation af støkiometrien.

### 3.9.2. Specifikation af koordinationsforbindelsers konstitution

#### 3.9.2.1. Angivelse af direkte binding mellem centralatomer

Når der i koordinationsforbindelser er direkte binding mellem centralatomer, angives det ved en efterstillet parentes med de involverede centralatomers grundstofsymboler, adskilt af en lang bindestreg uden mellemrum, eksempelvis:

$(\text{OH})_2\text{OP}-\text{PO}(\text{OH})_2$	bis(dihydroxidooxidophosphor)( <i>P—P</i> ) (jf. 3.4.2)
$[(\text{OC})_5\text{Mn}-\text{Mn}(\text{CO})_5]$	decacarbonyldimangan( <i>Mn—Mn</i> ) eller bis(pentacarbonylmangan)( <i>Mn—Mn</i> )
$[(\text{OC})_5\text{ReCo}(\text{CO})_4]$	nonacarbonylrheniumcobalt( <i>Re—Co</i> )

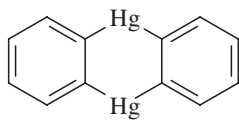
Det sidste navn specificerer ikke konstitutionen fuldt ud; se udbygningen af navnet nedenfor i 3.9.2.3. Vedrørende grundstofrækkefølgen må henvises til [3b, IR-9.2.5.3].

#### 3.9.2.2. Angivelse af broligander

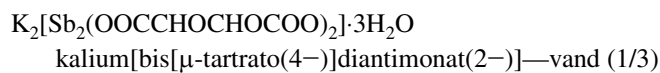
Ligander, der danner bro mellem centralatomer, markeres i navnet med det foranstillede symbol  $\mu$ -, eksempelvis (se også 3.4.3.2):

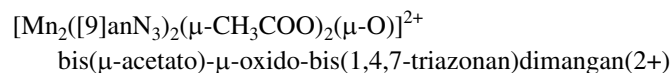


di- $\mu$ -chlorido-bis(dichloridoaluminium)



di- $\mu$ -(*o*-phenylen)-dikhviksølv  
phenomercurin (tabel 7)

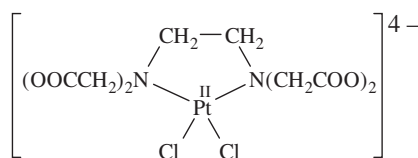
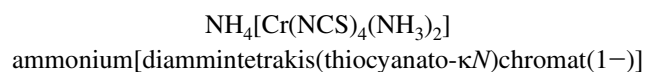




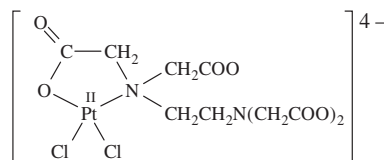
### 3.9.2.3. Angivelse af ligatorer (ligerende atomer)

#### Brug af $\kappa$

Når ligander kan binde til (ligere) centralatomer med flere atomer (ligatorer), kan man i koordinationsnavne for forbindelser af disse ligander få brug for at specificere det eller de ligerende atomer. Det gøres generelt ved brug af det græske bogstav kappa  $\kappa$ .

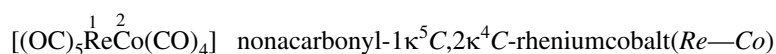
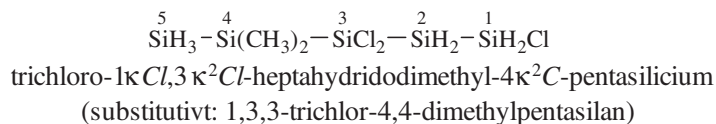


dichlorido[(ethylenedinitrilo- $\kappa^2 N, N'$ )tetraacetato]platinat(4 -)

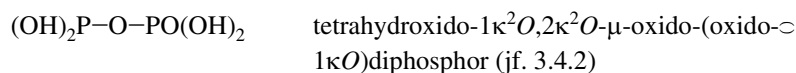
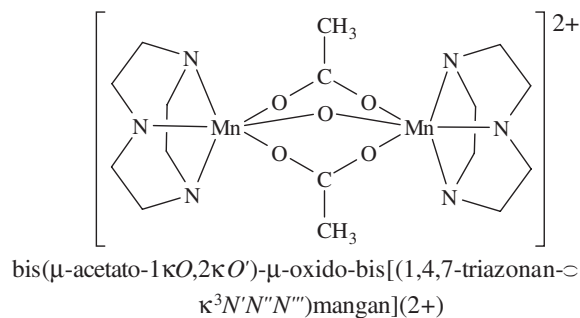


dichlorido[(ethylenedinitrilo- $\kappa N$ )tetraacetato- $\kappa O$ ]platinat(4 -)

Når der er flere centralatomer, nummereres de efter særlige regler [3b], hvoraf én siger, at når centralatomerne er ens, skal det samlede ligandsæt have lavest mulig nummerering. Centralatomnumrene kombineres så med kappa-angivelserne for at vise, til hvilke centralatomer de pågældende ligatorer binder. Vi giver blot nogle få eksempler for at illustrere denne udbygning af nomenklaturen.

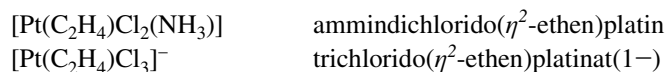


Vi mødte denne forbindelse ovenfor i 3.9.2.1. Navnet her er mere oplysende end det ovenfor, da både ligatorer og ligandernes fordeling på de centralatomer fremgår.



### Brug af $\eta$

I situationer med adskillige ligatorer, navnlig ved ligander med multiligatorbinding betinget af delokaliserede elektronsystemer, har man indført en yderligere notationsmåde, som er en slags videreudvikling af kappa-notationen. En ligandbetegnelse kan udstyres med bogstavet eta,  $\eta$  (læses »hap to«), samt enten en streng af ligatornumre eller et ligatorantal anbragt som superskript til eta for at tilkendegive, hvilke eller hvor mange atomer i den pågældende ligand der er koordineret til et givet centralatom.

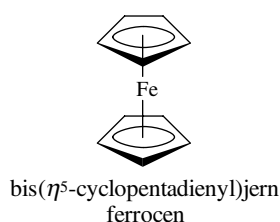




Begge ethens carbonatomer er involveret i bindingen til platin i disse forbindelser [den anden er anionen i Zeises salt (triv.)].



De tre carbonatomer i hver  $\text{C}_3\text{H}_5$ -ligand binder alle til chrom.



De fem carbonatomer i hver cyclopentadienylligand binder alle til jern. Bemærk, at forbindelsen også kan navngives bis( $\eta^5$ -cyclopentadienido)jern(II). Valget mellem disse navne kan ikke træffes på baggrund af eksisterende nomenklaturregler.

### ***Metalloccener***

Ferrocen (se ovenfor) er repræsentant for en hel klasse af forbindelser, metalloccenerne, alle med et metalatom koordineret mellem to cyclopentadienylringe. IUPAC anerkender navnene (manganocen, ferrocen, osmocen, nikkelocen, osv.) som stamhydridnavne, hvoraf kan dannes afledninger som 1,1'-dimethylnikkelocen og 2-osmocenylethanol.

## **3.10. Polymerer**

Polymerkemien er overordentlig kompleks fra et nomenklatur synspunkt, i hvert fald så snart man bevæger sig bort fra enstregede polymerer, og IUPAC har kun givet regler for navngivning af forholdsvis simple polymerer. Selv for sådanne er der vanskeligheder med at forene principperne for navngivning af uorganiske og organiske polymerer. Derudover har man forsøgt at fastlægge en del terminologi til brug ved specifikation af kædelængdefordelinger, fysiske egenskaber mv. af ensembler af polymermolekyler. Den type informationer er i princippet uvedkommende for strukturel

nomenklatur for rene forbindelser, men kan selvfølgelig være relevante i praksis, hvor man sjældent har sådanne for polymerernes vedkommende.

Vi vil her holde os til de helt simple tilfælde af navne for (abstrakte) enstrengede polymerer, dvs. forbindelser af typen  $\text{-(CRU)}_n\text{-}$ , hvor  $n$  er et »stort« tal og CRU er en minimal repeterende enhed i polymerstrukturen (IUPAC's forkortelse for *constitutional repeating unit*) – dels *strukturelle* navne, dels *monomerbaserede navne*. For yderligere detaljer må vi henvise til [5] samt [9, II-7].

### 3.10.1. Strukturel nomenklatur for udvalgte enstrengede og kvasi-enstrengede polymertyper

#### 3.10.1.1. Repeterende enhed

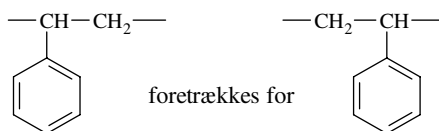
Efter valg af den repeterende enhed i en enstrengt polymer og navngivning af den, kan et strukturelt navn for polymeren konstrueres, jf. 1.3.9.1.

IUPAC's regler for valg af repeterende enhed gengives ikke her i deres helhed, men de vigtigste træk er, at

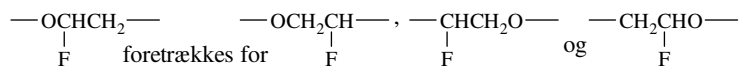
- enheden skal have lavest mulig valens
- den skal vælges og opskrives således, at underenheder af den repeterende enhed af højest prioritet kommer først ved passage fra venstre mod højre og således, at efterfølgende nummerering (som også sker fra venstre) af eventuelle substituentter giver lavest mulige numre.

[Reglerne for prioritering af underenheder er noget komplicerede, men ved simple (organiske) polymerer er det ofte tilstrækkeligt at ordne kædeatomer efter faldende prioritet i rækken  $\text{O} > \text{S} > \text{Se} > \text{N} > \text{P} > \text{As} > \text{C}$ . Et andet princip er alfabetisk og numerisk rækkefølge af underenhederne.]

$\text{-CH=CH-}$  foretrækkes for  $\text{=CH-CH=}$   
(lavest mulig valens for CRU)



(CRU vælges med phenylsubstituenten lavest nummereret fra venstre)



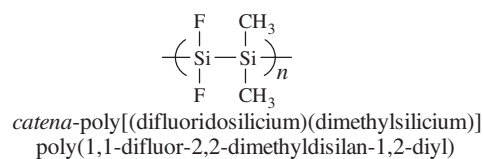
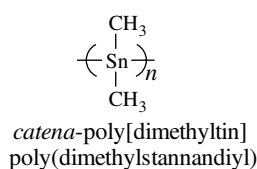
Disse fire måder at vælge og opskrive CRU for polymeren  $(\text{OCHFCH}_2)_n$  på ville give navnene hhv. poly[oxy(1-fluorethylen)], poly[oxy(2-fluorethylen)], poly[(1-fluorethylen)oxy] og poly[(2-fluorethylen)oxy], hvoraf altså det første foretrækkes (O > C og '1-fluor' foretrækkes for '2-fluor').

Se også sidste eksempel i 3.10.1.3 og eksemplerne i 3.10.2.

### 3.10.1.2. Homoatomige ikke-carbonkæder

For polymerer med homoatomig kæde, fraregnet dem med carbonkæder, opfattes den repeterende enhed som opbygget af underenheder, der hver udgøres af ét kædeatom med tilhørende ligander. Hver underenhed navngives ved koordinationsnomenklatur, og det samlede navn for den repeterende enhed anbringes i kantet parentes. Alternativt navngives den samlede repeterende enhed substitutivt ud fra det tilsvarende stamhydrid:

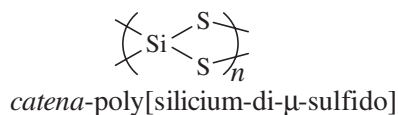
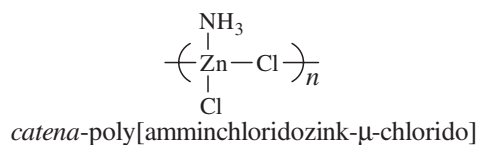
$(\text{S})_n$ , *catena*-poly[svovl] eller poly(sulfandiyl)



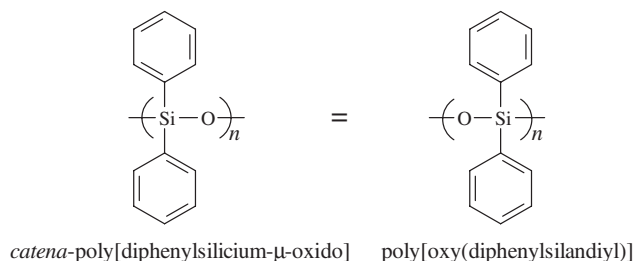
Bemærk i det sidste eksempel alfabetisk rækkefølge af underenhederne i koordinationsnavnet.

### 3.10.1.3. Polymerkæder med broligander

Indgår der broligander enten i eller uden for hovedkæden i en polymer (i det sidste tilfælde er den strengt taget ikke enstrengt, men kun *kvasi-enstrengt*), navngives CRU med disse *til sidst* i navnet i modsætning til hvad vi så ved koordinationsnomenklatur for flerkernede komplekser (3.9.2).



$\text{---N=P(Cl)}_2\text{---}_n$ , *catena*-poly[(dichloridophosphor)- $\mu$ -nitrido]  
eller poly[nitrilo(dichlor- $\lambda^5$ -phosphantriy)]




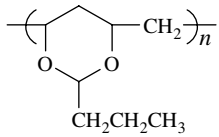
I hvert af de to sidste eksempler er det første navn koordinationsnavnet i henhold til nærværende afsnit; i det næste navn er valgt repeterende enhed og navn ud fra principperne skitseret i 3.10.1.1. Et tredje navn for den sidste forbindelse er poly(diphenylsiloxan), jf. 2.3.3.

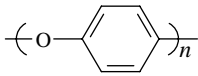
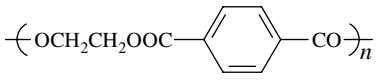
## 3.10.2. Monomerbaseret polymernavngivning

En del hævdundne polymernavne fortæller snarere, hvilket (evt. hypotetisk) udgangsmateriale, polymeren (formelt) kan fremstilles af, end hvilken

struktur, den har. IUPAC har valgt at acceptere en række sådanne *source names*. Vi giver her nogle eksempler på monomerbaserede navne, ledsaget af strukturelle navne dannet ud fra de ovenfor antydede principper (3.10.1):

<b>Formel</b>	<b>Monomerbaseret navn/ strukturelt navn</b>
$\text{-(CH}_2\text{)}_n$	polyethen/poly(methylen)
$\text{-(CH(CH}_3\text{)CH}_2\text{)}_n$	polypropen/poly(propylen), poly(propan-1,2-diyl)
$\text{-(}\overset{\text{CH}_3}{\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}\text{CH}_2\text{)}_n$	poly(2-methylpropen)/poly(1,1-dimethylthythylen)
$\text{-(}\overset{\text{CH}_3}{\text{C}}\text{=CHCH}_2\text{CH}_2\text{)}_n$	polyisopren/poly(1-methylbut-1-en-1,4-diyl)
$\text{-(}\overset{\text{Cl}}{\text{C}}\text{=CHCH}_2\text{CH}_2\text{)}_n$	poly(2-chlorbuta-1,3-dien)/poly(1-chlorbut-1-en-1,4-diyl)
$\text{-(}\overset{\text{C}_6\text{H}_5}{\text{CH}}\text{CH}_2\text{)}_n$ 	polystyren/poly(1-phenylethylen)
$\text{-(}\overset{\text{CN}}{\text{CH}}\text{CH}_2\text{)}_n$	polyacryl(o)nitril/poly(1-cyanethylen)
$\text{-(}\overset{\text{OH}}{\text{CH}}\text{CH}_2\text{)}_n$	poly(vinylalkohol)/poly(1-hydroxyethylen)

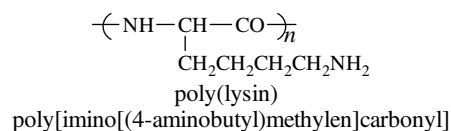
<i>Formel</i>	<i>Monomerbaseret navn/ strukturelt navn</i>
$\left( \begin{array}{c} \text{CHCH}_2 \\   \\ \text{OCOCH}_3 \end{array} \right)_n$	poly(vinylacetat)/poly(1-acetoxyethylen)
$\left( \begin{array}{c} \text{CHCH}_2 \\   \\ \text{Cl} \end{array} \right)_n$	poly(vinylchlorid)/poly(1-chlorethylen)
$\left( \begin{array}{c} \text{F} \\   \\ \text{CCH}_2 \\   \\ \text{F} \end{array} \right)_n$	poly(vinylidenfluorid)/poly(1,1-difluorethylen)
$\left( \text{CF}_2\text{CF}_2 \right)_n = \left( \text{CF}_2 \right)_n$	poly(tetrafluorethen)/poly(difluormethylen)
	poly(vinylbutyral)/poly[(2-propyl-1,3-dioxan-4,6-diyl)methylen] NB: monomernavn ikke systemnavn
$\left( \begin{array}{c} \text{CHCH}_2 \\   \\ \text{COOCH}_3 \end{array} \right)_n$	poly(methylacrylat)/poly[1-(methoxycarbonyl)ethylen]
$\left( \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CCH}_2 \\   \\ \text{COOCH}_3 \end{array} \right)_n$	poly(methylmethacrylat)/poly[1-(methoxycarbonyl)-1-methylethylen]

<b>Formel</b>	<b>Monomerbaseret navn/ strukturelt navn</b>
$\text{-(OCH}_2\text{)}_n$	polyformaldehyd/poly(oxymethylen)
$\text{-(OCH}_2\text{CH}_2\text{)}_n$	poly(ethylenoxid), poly(ethylenglycol)/poly(oxyethylen)
	poly( <i>p</i> -phenylenoxid)/poly(oxy- <i>p</i> -phenylen)
	poly(ethylterephthalat)/poly(oxyethylenoxyterephthaloyl) (se også nedenfor under copolymerer)
$\text{-(NHCO(CH}_2\text{)}_4\text{CONH(CH}_2\text{)}_6\text{)}_n$	poly(hexamethylenadipamid)/poly[imino(1,6-dioxohexan-1,6-diyl)iminohexan-1,6-diyl]
$\text{-(NHCO(CH}_2\text{)}_5\text{)}_n$	poly(hexano-6-lactam)/poly[imino(1-oxohexan-1,6-diyl)] (jf. 3.3.2.8)

En række gængse polymernavne er baseret på ikke-accepterede monomernavne (fx polyethylen, polychloropren, polyisobutylen); disse eller de tilsvarende monomernavne må søges i *Kemiske Ord*.

### **Simple polypeptider**

Disse navngives helt analogt, dvs.



### **Copolymerer**

Også copolymerer kan navngives ud fra de indgående monomerer, eksempelvis (monomernavnene anføres i alfabetisk rækkefølge)

copoly(formaldehyd/urinstof)

copoly(ethylenglycol/terephthalsyre), ovenfor kaldet poly(ethylenterephthalat)

copoly(butadien/methylmethacrylat/styren)

## **3.11. Naturstoffer. Vigtige stofklasser fra biokemien**

I modsætning til hvad tilfældet er med grundlæggende organisk-kemisk og uorganisk-kemisk nomenklatur, hvor man i en generation har haft permanente IUPAC-kommissioner, der med mellemrum udsendte anbefalinger (sidst [1,2] for den organiske og [3,9] for den uorganiske nomenklatur vedkommende), har man på det biokemiske og naturstofkemiske område en mere kompliceret situation. Fælles arbejdsgrupper mellem IUPAC og IUB, hhv. IUBMB (jf. 1.2) har over de sidste 30 år udsendt lejlighedsvis bulletiner vedrørende mindre områder, hvor man i et vist omfang har forsøgt at harmonisere specialnomenklatur med den på det tidspunkt gældende generelle organiske nomenklatur.

I 1992 samlede og kommenterede IUBMB og IUPAC en række af disse bidrag i bogen [6], der er det bedste bud i dag på én kilde til biokemisk og naturstofkemisk nomenklatur. Nogle områder er opdateret igen siden da, se [8,10] og 3.11.1.3. I nærværende afsnit præsenterer vi nogle ganske få elementer af denne nomenklatur. Hvor der er berøring med den generelle organiske nomenklatur, har vi så vidt muligt rettet ind efter [2]. (Konkret eksempel: nedenfor vil man ikke finde navne med præfikset 'mercapto' (for HS-), som er udbredt i de i [6] medtagne bulletiner.)

Referencer vil nedenfor blive givet til relevante afsnit i [6], ikke til de oprindelige publikationer i *Eur. J. Biochem.* og andre tidsskrifter. Opslag i [6] sikrer, at man får de lejlighedsvis 1992-kommentarer med, som står dér.



### 3.11.1. Aminosyrer, peptider, proteiner. Enzymer

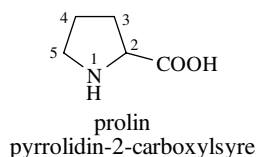
#### 3.11.1.1. Aminosyrer

Nomenklaturmæssigt behøvede der sådan set ikke være noget specielt ved aminosyrer (forstået som carboxylsyrer med en eller flere substituenter  $-\text{NH}_2$ ), og tabel 15 giver da også navne på de biokemisk vigtigste af dem, som er konstrueret helt efter principper beskrevet i det foregående. Der har dog udviklet sig en omfattende specialistnomenklatur, bl.a. pga. aminosyrernes betydning i peptid- og proteinkemien, og IUPAC har sanktioneret en del af denne [6, s. 39-81]. Vi kan inden for denne bogs rammer kun behandle de vigtigste træk.

De i tabel 15 anførte accepterede trivialnavne for aminosyrerne kan indtil videre også anvendes som stamnavne, se nedenfor.

#### **Konstitution**

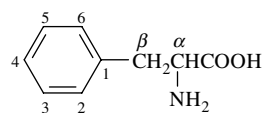
De *konstitutionelle* forhold hos aminosyrerne og derivater deraf kan som nævnt i princippet fuldt ud specificeres ved den ovenfor beskrevne systematiske nomenklatur med dens brug af lokanter og præfikser. Prolinskeletet vil på denne måde blive nummereret svarende til navnet pyrrolidin-2-carboxylsyre:



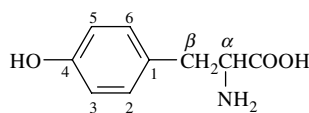
og derivater af prolin navngivet derefter, fx 4-hydroxyprolin.

Den tidligere brug af græske bogstaver som lokanter anbefales ikke mere, bortset fra, at man gerne som stofklassebetegnelse må bruge fx  $\alpha$ -aminosyrer (aminosyrer med  $-\text{NH}_2$  på nabocarbon til en carboxylgruppe) eller tale om  $\alpha$ -carbonatomet. Der er dog ialt fem undtagelser.

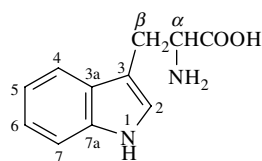
For phenylalanin, tyrosin og tryptophan specificeres positioner i sidekæderne med græske bogstaver som vist her:



phenylalanin  
2-amino-3-phenylpropansyre



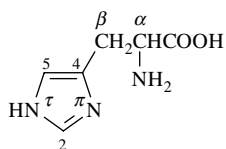
tyrosin  
4-hydroxyphenylalanin



tryptophan  
2-amino-3-(1*H*-indol-3-yl)propansyre

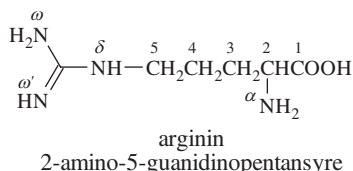
Bemærk det *accepterede trivialnavn* tyrosin og det ikke fuldt systematiske *systemnavn* 4-hydroxyphenylalanin (jf. 1.3.1). Et systematisk navn, i sidstnævnte tilfælde 2-amino-3-(4-hydroxyphenyl)propansyre, kan ses i tabel 15.

I histidin gør noget tilsvarende sig gældende for sidekæden. Desuden har man på baggrund af forvirring i litteraturen om ringnummereringen skåret igennem og foreslået lokanterne  $\pi$  (for *pros* (græsk), nær) og  $\tau$  (for *tele* (græsk), fjern) for henholdsvis det nære og fjerne nitrogen i forhold til kæden.



histidin  
2-amino-3-(1*H*-imidazol-4-yl)propansyre

Endelig har man i arginin indført de viste lokanter for guanidngruppens nitrogenatomer:



Når de anerkendte aminosyretrivialnavne anvendes som stamnavne med de anførte lokanter, får man navne for afledte forbindelser som

3-hydroxytyrosin [har også det anerkendte trivialnavn dopa, som samtidig er et akronym (baseret på et forældet navn), jf. tabel 15]

3,5-diidotyrosin

methionin-*S*-oxid

methionin-*S,S*-dioxid

$\beta$ -hydroxy-*N*<sup>1</sup>-methyltryptophan

*N* <sup>$\alpha$</sup> ,*N* <sup>$\delta$</sup> ,*N* <sup>$\omega$</sup> ,*N* <sup>$\omega'$</sup> -tetramethylarginin

*N*<sup>2</sup>,*N*<sup>6</sup>-diacetyllysin

*N* <sup>$\tau$</sup> -methylhistidin eller *telemethylhistidin*

### Stereokemi

Absolutkonfigurationen omkring  $\alpha$ -carbonatomet i  $\alpha$ -aminosyrerne kan principielt specificeres ved *R,S*-systemet (2.7.4.3). For at få relationen mellem de forskellige aminosyrers stereokemi tydeligere frem anvendes dog sædvanligvis *D,L*-systemet (2.7.4.3). For absolutkonfiguration ved andre carbonatomer anbefales det altid at anvende *R,S*-systemet, altså fx (*3R*)-L-threonin eller, hvis man kun vil bruge ét notationssystem, (*2S,3R*)-threonin. For prolinderivater kan substituenteres relative position i forhold til ringen endvidere også angives ved *cis* og *trans*, jf. 2.7.4.4; således er (*4S*)-4-hydroxy-L-prolin, (*2S,4S*)-4-hydroxyprolin og *trans*-4-hydroxy-L-prolin tre navne for én og samme forbindelse.

Hvis *D* eller *L* ikke specificeres, er det sædvanligvis enten underforstået, at det drejer sig om den naturligt forekommende form, eller der tænkes på den racemiske blanding (hvilket kan tydeliggøres ved at skrive *DL*- eller *rac*- foran), eller det er i konteksten ligegyldigt med stereokemien.

Præfikset 'allo' tillades nu kun i navnene alloisoleucin og allothreonin, jf. tabel 15.

**Anden aminosyrenomenklatur**

Af aminosyrerne kan afledes *substituentgrupper*, som naturligvis kan navngives fuldt systematisk. Visse af dem har dog konventionelt været navngivet ud fra de anerkendte trivialnavne for aminosyrerne, som eksemplificeret her:

glycyl, dss. aminoacetyl             $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CO}-$   
 alanyl, dss. 2-aminopropanoyl     $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$   
 tryptophyl, dss. 2-amino-3-(1*H*-indol-3-yl)propanoyl

I et par af tilfældene skal man passe på:

cystyl, dss. 2,7-diamino-4,5-dithiaoctandioyl,  
 $-\text{OCCH}(\text{NH}_2)\text{CH}_2\text{SSCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$

cysteinyll, dss. 2-amino-3-sulfanylpropanoyl,  $\text{HSCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$

(Man kunne så bruge cysteyll for cysteinsyrens acylgruppe, 2-amino-3-sulfopropanoyl, men her er det nok tilrådeligt med det systematiske navn for at undgå forvirring. IUPAC anerkender endvidere navnet halv-cystyl for den divalente substituentgruppe  $-\text{SCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$ ).

aspartoyll, 2-aminobutandioyl,  $-\text{OCCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$   
 aspart-1-yl, 2-amino-3-carboxypropanoyl,  $\text{HOOCCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$   
 aspart-4-yl, 3-amino-3-carboxypropanoyl,  $-\text{OCCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$   
 asparaginyll, 2-amino-3-carbamoylpropanoyl,  $\text{H}_2\text{NCOCH}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CO}-$

og tilsvarende for glutamoyll, glutam-1-yl, glutam-5-yl og glutaminyll. (Tidligere brugtes græske bogstaver som lokanter i disse navne).

Endelsen -o signalerer dannelse af en substituentgruppe ved fjernelse af et H fra en aminogruppe, fx glycino [dss. (carboxymethyl)amino], *N*<sup>6</sup>-lysino, *N*<sup>2</sup>-lysino, *N*<sup>π</sup>-histidino.

Afledninger af aminosyrerne navngives efter sædvanlige principper med relevante lokanter: *S*-cyancystein, *O*<sup>3</sup>-acetylserin, methylprolinat, asparaginsyre-*O*<sup>4</sup>-methylester.

Modifikation af 1-carboxylsyregruppen fører til forholdsvis indlysende navne som leucinamid (for 2-amino-4-methylpentanamid), alaninal (for 2-aminopropanal), serinol (for 2-aminopropan-1,3-diol). Bemærk, at asp

araginsyres 4-amid er asparagin; 1-amidet har også det tilladte navn isoasparagin. Tilsvarende for glutamin og isoglutamin.

Ovenfor har aminosyrene været repræsenteret ved de ladningsfrie strukturer. Zwitterionstrukturer, hhv. kationer og anioner navngives efter følgende læst:

glycinzwitterion (eller ammonioethanoat)	$\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{COO}^-$
glycinkation, glycinium	$\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{COOH}$
glycinanion, glycinat	$\text{H}_2\text{NCH}_2\text{COO}^-$

Se også tabel 15, fodnote vedrørende aminosyreanionnavne.

### 3.11.1.2. Peptider, proteiner

Det grundlæggende princip i navngivning af *oligopeptider*, molekyler bestående af et mindre antal  $\alpha$ -aminosyrer sammenknyttet ved *peptidbindinger* (amidbindinger mellem en carboxylsyregruppe fra én aminosyre og en andens  $\alpha$ -aminogruppe), er substitutivt, idet man anfører acylsubstituentbetegnelserne svarende til aminosyreresterne i rækkefølge fra den N-terminale ende som én lang substituent til den C-terminale aminosyre (den med den frie carboxylsyregruppe nabo til peptidbindingen), fx L-alanyl-L-leucin, L-alanyl-D-leucin, L-leucyl-L-alanin, alanylalanylprolylphenylalanin (L-former underforstået).

Tripeptidet glutathion er glutam-5-ylcysteinylglycin, stadig underforstået ud fra lutter L-aminosyrer:



Så snart man er oppe på mere end 3-5 aminosyrerester – og ikke mindst, hvis der er tale om forgrenede eller cykliske peptider eller peptider, der også indeholder andre bindinger end peptidbindinger (fx esterbindinger) – bliver denne form for nomenklatur selvfølgelig for uhåndterlig, og man må så anvende andre notationsmåder end egentlige navne, fx baseret på trebogstavskoderne anført i tabel 15. Peptiderne nævnt overfor bliver så: Ala-Leu, Ala-D-Leu, Leu-Ala, Ala-Ala-Pro-Phe, Glu(-Cys-Gly) og octapeptidet angiotensin II (equint) skrives

Asp-Arg-Val-Tyr-Ile-His-Pro-Phe.

Bemærk den særlige notation for glutathion; Glu-Cys-Gly ville være glutamyl-L-cysteinylglycin.

*NB:* Cys-Cys er cysteinylcystein og således ikke identisk med cystin.

**Derivater af peptider** navngives ved standardnomenklaturoperationer:

Suc-Ala-Ala-Pro-Phe, (*N*-succinylalanyl)alanylprolylphenylalanin (succinyl, se tabel 9)

leukotrien C, (*7E,9E,11Z,14Z*)-(5*S,6R*)-6-(glutathion-*S*-yl)-5-hydroxyicosasa-7,9,11,14-tetraensyre  
aspartam (triv.), *N*-(*L*-aspart-1-yl)-*L*-phenylalaninmethylester

For **polypeptider** med 10-50 aminosyrerester i kæden og **proteiner** med op til flere hundrede aminosyrerester anvendes ofte en notation baseret på én-bogstavkoderne, som også fremgår af tabel 15.

Systematisk navngivning baseret på struktur er klart af begrænset interesse i forbindelse med proteiner, dels fordi navnene uvægerligt bliver alt for lange, dels fordi der ofte er brug for navngivning længe før strukturen er blot tilnærmelsesvis kendt. En række konventionelle navne er eksplicit godkendt af IUPAC/IUBMB og medtaget i visse tilfælde i *Kemiske Ord*, herunder navne på visse hormoner, som er behandlet i [6, s. 82-83] og en række elektrontransportproteiner [7, s. 534-563].

### 3.11.1.3. Enzymer

For *enzymer*, der er proteiner med katalytisk virkning, har man traditionelt navngivet ud fra et substrat for det pågældende enzym, dvs. en forbindelse, hvis omdannelse blev katalyseret af enzymet, eventuelt suppleret med et in-fiks for den reaktion, der katalyseredes, idet man tilføjede endelsen 'ase': peptidaser, lipase (fedtspaltende enzym), phytase, acyltransferaser, glucoseoxidase.

En hel række trivialnavne har også været og er i anvendelse: katalase, trypsin, notatin (for glucoseoxidase).

Mere systematisk navngivning, stadig baseret på kemiske reaktioner, som katalyseres af enzymet, er eksemplificeret her:

lipase (EC 3.1.1.3), triacylglycerol-acylhydrolase  
glucoseoxidase (EC 1.1.3.4),  $\beta$ -D-glucose:dioxygen-1-oxidoreductase  
katalase (EC 1.11.1.6), hydrogenperoxid:hydrogenperoxid-oxidoreductase

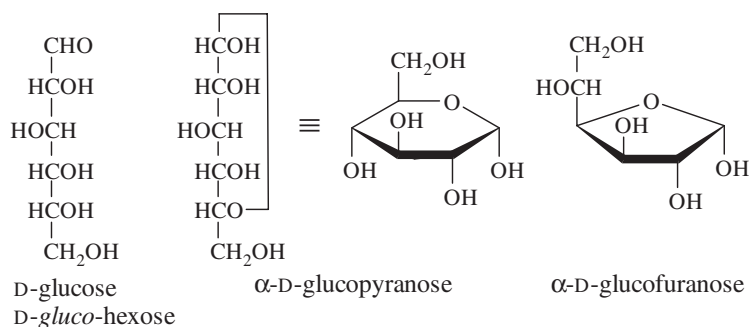
Numrene i parentes refererer til en klassifikation, der gennemføres for – i princippet – alle i litteraturen beskrevne enzymer i *Enzyme Nomenclature* [7]. De 6 hovedklasser er: oxidoreductaser, transferaser, hydrolaser, lyaser (katalyserer brydning af bindinger ved andre reaktioner end hydrolyser og redoxreaktioner; eksempel: decarboxylaser), isomeraser og ligaser (katalyserer dannelse af bindinger). Klassifikation på basis af katalyserede reaktioner er dog ikke altid let, og omklassifikationer er ofte nødvendige.

### 3.11.2. Carbohydrater

Også carbohydraterne kunne i princippet navngives éntydigt ved hjælp af den generelle systematiske nomenklatur. Blot ville man derved ikke få vigtige strukturelle ligheder og forskelle frem mellem carbohydrater med carbonskelet af forskellig størrelse, mellem aldoser/ketoser og tilsvarende reducerede forbindelser (fx alditoler) og oxiderede forbindelser (fx uronsyurer). Derfor har man udviklet en speciel carbohydratnomenklatur, og den er sidste gang blevet gennemarbejdet af IUPAC i 1996 [8]. Grundreglerne ligner meget dem, der gengives i 1992-bogen [6, s. 127-148]. Da disse regler er almindelig kendt nu fra lærebøger og videnskabelige publikationer, skal her blot kort ved eksempler repeteres de vigtigste typer navne. Alle navne på enkeltforbindelser, der nævnes eksplicit i dette afsnit, er IUPAC-godkendte.

#### 3.11.2.1. Monosaccharider: aldoser og ketoser

Typiske repræsentanter for de to klasser er glucose og fructose, begge vist i deres D-form nedenfor. Se 2.7.4.3 vedrørende definitionen af de stereokemiske deskriptorer D og L for carbohydrater ud fra absolutkonfigurationen af glyceraldehyd. Hvor D,L ikke specificeres i det følgende, er det sagte underforstået at gælde for begge former.

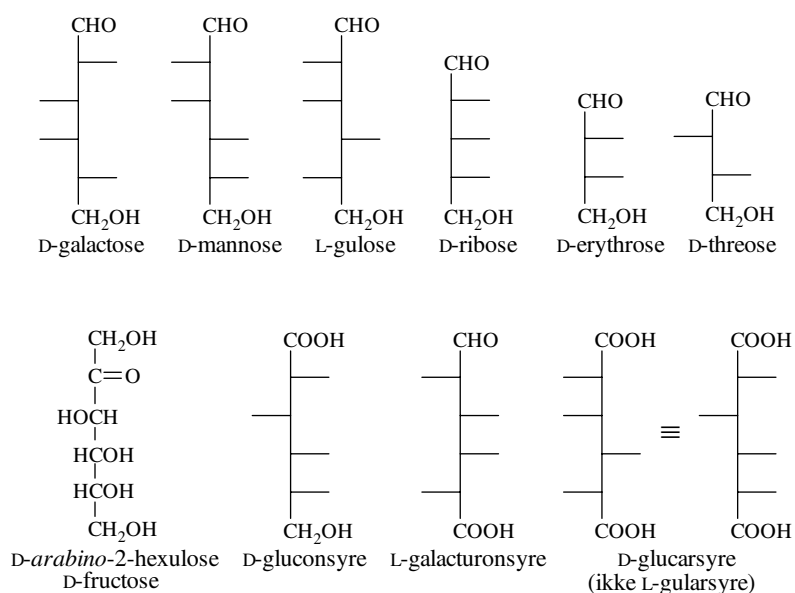


De laveste aldoser er

- aldotriosen:** glycerinaldehyd  
**aldotetroserne:** erythrose, threose  
**aldopentoserne:** arabinose, lyxose, ribose, xylose  
**aldohexoserne:** allose, altrose, galactose, glucose, gulose, idose, mannose og talose

Glycerinaldehyd er 2,3-dihydroxypropanal, aldotetroserne er 2,3,4-trihydroxybutanaler, aldopentoserne er 2,3,4,5-tetrahydroxypentanaler osv. Strukturerne af udvalgte forbindelser fra denne liste er vist nedenfor. Den første del af navnene bruges også systematisk som præfikser, således at aldoserne hedder D- og L-*glycero*-triose, *erythro*-tetrose, *arabino*-pentose, *gluco*-hexose, *galacto*-hexose osv., og også for andre forbindelser, der fraregnet endegrupperne har samme konfiguration som den pågældende aldose. Fructose er ketosen *arabino*-2-hexulose, dvs. en 1,3,4,5,6-pentahydroxyhexan-2-on med samme konfiguration som arabinose for så vidt angår fragmentet bestående af carbonatom nr. 3-6. Andre ketoser med godkendte trivialnavne er ribulose (*erythro*-2-pentulose), xylulose (*threo*-2-pentulose) og sorbose (*xylo*-2-hexulose).





Ringslutede halvacetalformer af aldohexoser, aldopentoser og ketohexoser navngives som pyran- hhv. furanderivater som eksemplificeret ovenfor med strukturerne for  $\alpha$ -D-glucopyranose og  $\alpha$ -D-glucofuranose, nedenfor med sucrose og raffinose i 3.11.2.5. Bemærk brugen af  $\alpha$  og  $\beta$  til specificifikation af anomeriforholdene i acetalgruppen, jf. 2.7.4.6.

Vil man understrege, at der er tale om den acykliske form, kan præfikserne *aldehydo-* og *keto-* bruges, fx for strukturerne på figuren ovenfor: *aldehydo*-D-galactose, *keto*-D-fructose osv.

### 3.11.2.2. Carboxylsyrer afledt af monosaccharider (aldonsyrer, uronsyrer, aldarsyrer, ketoaldonsyrer)

Oxidation af aldehydgruppen i aldoser giver **aldonsyrer**. Den laveste, svarende til glycerinaldehyd, er glycerolsyre, 2,3-dihydroxypropansyre, men ellers er systemet, at endelsen 'ose' erstattes med endelsen 'onsyre', dvs. man får erythrionsyre, threonsyre, ribonsyre, gulonsyre, gluconsyre osv. Strukturen af D-gluconsyre er vist som eksempel på figuren i forrige afsnit.

Oxidation af hydroxygruppen længst væk fra aldehydgruppen fører til **uronsyrer**, altså erythruronsyre, threuronsyre, riburonsyre, glucuronsyre osv. Struktureksemplet er D-galacturonsyre på figuren fra før.

Dicarboxylsyren svarende til oxidation af begge endegrupper i en aldose kaldes generelt en **aldarsyre**. Da distinktionen mellem carbon nr. 1 og

det højest nummererede carbonatom er forsvundet i disse forbindelser, må der særskilte regler til for at afgøre, hvilken ende, der lægges til grund for navngivningen. Første regel er alfabetisk præference, dvs. navnet D-glucosyre foretrækkes for L-gularsyre, jf. igen figuren i 3.11.2.1.

Da de to ender af molekylet er ens, er der mulighed for mesofobindelser, altså achirale forbindelser med symmetriplan. Disse kan for klarheds skyld tilføjes præfikset *meso*-, altså fx *meso*-galactarsyre, men det er altså i princippet overflødigt. Bemærk, at L-threarsyre er (*R,R*)-vinsyre, D-threarsyre er (*S,S*)-vinsyre og erythrarsyre er *meso*-vinsyre eller (*R,S*)-vinsyre.

Den til en ketose svarende forbindelse, hvor den primære alkoholgruppe på carbon nr. 1 er blevet oxideret til en carboxylsyregruppe, kaldes en **ketoaldonsyre**, og man får navne som fructosonsyre (*arabino*-2-hexulosonsyre), eller, for den ringsluttede version svarende til fructofuranose, fructofuranosidonsyre; ribulosonsyre (*erythro*-2-pentulosonsyre); osv.

### 3.11.2.3. Alditoler

De til aldoserne svarende polyoler navngives ved hjælp af de ovennævnte konfigurationspræfikser afledt af aldosenavnene. Ligesom ved aldarsyrerne vælges navn efter alfabetisk præference, når de to ender af molekylet svarer til forskellige grundkonfigurationer. Man får altså threitol (hhv. D- og L-) og erythritol (*meso*-forbindelsen) for de to butantetroler; arabinitol (ikke lyxitol), ribitol og xylitol for de tre pentanpentoler; galactitol, glucitol (ikke gulitol), mannitol osv. for hexanhexolerne.

### 3.11.2.4. Andre monosaccharidderivater (deoxymonosaccharider, chalcogenderivater, aminer, glycosider mv.)

Subtraktive og substitutive operationer (1.3.7, hhv. 1.3.8.4) på monosaccharidnavnene giver mulighed for at navngive et antal yderligere derivater, fx:

2-deoxy-D-*erythro*-pentose (tilladt halvsystematisk navn: deoxyribose)

6-deoxy-L-mannose (tilladt trivialnavn: L-rhamnose)

2-amino-2-deoxy-D-glucopyranose (tilladt halvsystematisk navn: D-glucosamin)

3,6-anhydro-2,4,5-tri-*O*-methyl-*aldehydo*-D-galactose

3,4,5,6-tetra-*O*-acetyl-2-*S*-acetyl-2-thio-*aldehydo*-D-glucose

Bemærk den særlige etherkonstruktion i det fjerde navn og den særlige esterkonstruktion i det femte navn. Andre eksempler på esternavne baseret på carbohydratnavne kan ses i 3.7.2 og 3.7.5.

**Acetaler og halvacetaler** af monosacchariderne kan navngives radikofunktionelt (jf. 3.3.2.2, hhv. 3.3.2.4), fx

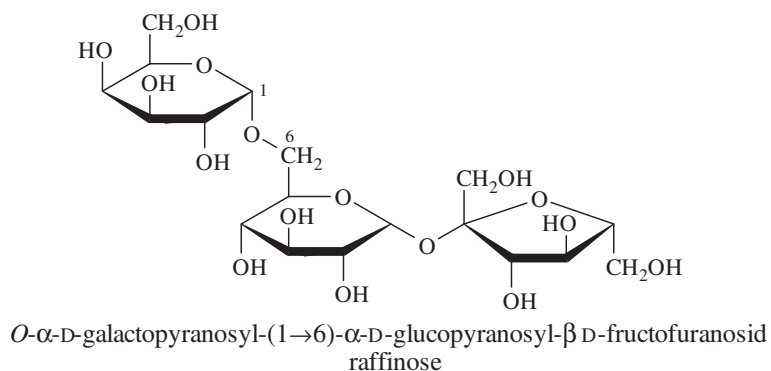
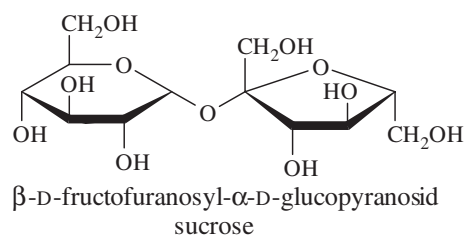
D-glucose(*S*-ethyl)(*O*-methyl)monothioacetal

Acetaler dannet ved substitution af –OH med en hydrocarbyloxygruppe på det *anomere* carbon i en halvacetalform af et monosaccharid, kaldet **glycosider**, navngives som eksempelvis methyl- $\alpha$ -D-glucopyranosid.

De substituentgruppenavne, der ses nedenfor i navnene på oligosacchariderne (galactopyranosyl osv.) kan også bruges i anden sammenhæng, fx glucopyranosylamin, D-altropyranosylbromid.

### 3.11.2.5. Oligo- og polysaccharider

Navngivningen er eksemplificeret for sucrose og raffinose nedenfor. Begge er såkaldt ikke-reducerende oligosaccharider, hvori der er fuldstændig acetaldannelse, og navnet er formelt et glycosidnavn (jf. forrige afsnit) baseret på det endestillede monosaccharid.



For reducerende oligosaccharider, som altså indeholder en endestillet halv-acetalgruppe, navngives ved substitution i det endestillede saccharid, fx for  $\alpha$ -lactose:

4-*O*- $\beta$ -D-galactopyranosyl- $\alpha$ -D-glucopyranose eller  
*O*- $\beta$ -D-galactopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 4)- $\alpha$ -D-glucopyranose

I stil med det ved peptiderne nævnte (3.11.1.2) kan man fastlægge en nomenklatur eller notation for kæder eller ringe af et større antal monosaccharidenheder. Bindingerne mellem de enkelte enheder kan etableres på mange måder, og disse må naturligvis afspejles i den valgte notation. Vi kan dog ikke komme nærmere ind herpå, men henviser til [6, s. 169-176] og [8].

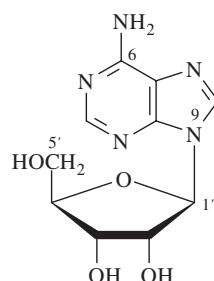
Endelsen 'an' signalerer polymerisation af et givet monosaccharid, men siger ikke noget strukturelt (glucan, poly(glucose), både cellulose og stivelse; xylan, poly(xylose) osv.).

### 3.11.3. Puriner/pyrimidiner, nucleosider og nucleotider

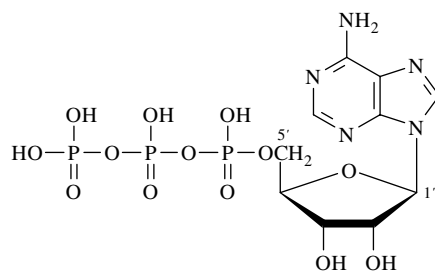
Som ved carbohydraterne er det grundlæggende den forlængst etablerede nomenklatur, der gælder; IUPAC-IUBMB giver kun sparsom yderligere vejledning [6, s. 109-114]. Eksemplerne adenosin og adenosintriphosphat nedenfor illustrerer hhv. navngivning af et nucleosid og et nucleotid.

**Purin-** og **pyrimidinbaserne** har accepterede trivialnavne: adenin, cytosin, guanin, hypoxanthin, orotsyre, thymin, uracil, xanthin (se *Kemiske Ord* for systematiske navne).

**Ribonucleosiderne** har tilsvarende navne: adenosin, cytidin, guanosin, inosin, orotidin, uridin, xanthosin. Bemærk, at thyminribonucleosid ikke er thymidin, som er (deoxyribosyl)thymin (jf. 3.11.2.4).



6-amino-9-β-D-ribofuranosylpurin  
adeninribonucleosid  
adenosin



adenosin-5'-tetrahydrogentriphosphat  
adenosintriphosphat

**Nucleotiderne** navngives som phosphorsyreestere af nucleosiderne, hvis navne ikke modificeres (analogt til navne for estere af carbohydrater som sådan, 3.7.2). Positioner i riboseringen angives med mærkede tal. Således får man for ATP, jf. figuren, adenosin-5'-triphosphat (eller, helt præcist for den fuldt hydroniserede form, ...-tetrahydrogentriphosphat). Cyklisk AMP, hvori ét phosphorsyremolekyle har dannet to esterbindinger til ribosedejen, bliver tilsvarende adenosin-3':5'-monohydrogenphosphat.

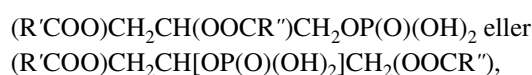
**Oligo-** og **polynucleotider** kan specificeres ved notationer, der minder om dem, der er antydnet for peptider og polysaccharider ovenfor. Dette emne falder dog uden for denne bogs rammer.

### 3.11.4. Lipider

Området må regnes som specialistnomenklatur, når bortses fra simple monoacyl-, diacyl- og triacylderivater af glycerol. Navngivningen af disse

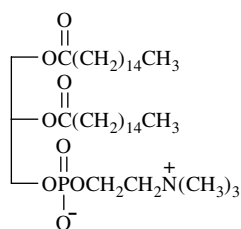
fremgår af 3.7.2.2. Bemærk, at de misvisende betegnelser mono-, di- og triglycerid frarådes af IUPAC.

En vigtig gruppe lipider, phospholipiderne, er baseret på phosphorsyreesterne af formen enten



hvor  $R'COOH$  og  $R''COOH$  er fedtsyrer. Sådanne forbindelser kaldes *phosphatidsyrer*.

Eksemplet nedenfor viser konventionel, endnu accepteret nomenklatur for et phospholipid (to navne) og et systematisk substitutivt navn, der er konstrueret ud fra principperne i 2.5 og præfikser fra tabellerne 8, 9 og 11.



1,2-dipalmitoyl-3-phosphatidylcholin  
dipalmitoylglycerophosphocholin  
[[2,3-(dipalmitoyloxy)propyloxy](oxido)-  
phosphoryloxyethylen]trimethylammonium

For yderligere vejledning om lipidnomenklatur henvises til [6, s. 180-191].

### 3.11.5. Diverse: steroider, terpener, carotenoider, tetrapyrroler

Dette afsnit samler nogle skitser af nomenklaturområder, som vi ikke kan gå i dybden med i nærværende bog, men som har det til fælles, at man til trods for den noget komplicerede kemi i det pågældende område kan komme et stykke vej med navne på nogle få stamforbindelser og ellers de konstruktioner, der er omtalt i den generelle nomenklaturgenngang ovenfor.

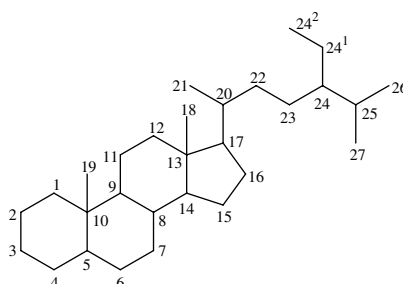
IUPAC's holdning til naturstofnomenklatur i almindelighed er, at man for at undgå for ubekvemme systematiske navne kan indføre stamnavne for

komplerede forbindelser. Sådanne navne må blot ikke være misvisende (fx må de ikke ende på 'ol', 'on' osv., hvis ikke forbindelsen indeholder de tilsvarende karakteristiske grupper), og de skal så vidt muligt referere til den biologiske kilde til forbindelsen. Eksempler på stamforbindelser, som er vist i tabellerne 5 og 14, er abietan (af abies (græsk), grantræ), morphinon (Morpheus (græsk), søvnens gud) og yohimban (fra *Corynanthe johimbe*). Ved hjælp af disse kan man navngive abietinsyre, codein, morphin, yohimbin osv.

### 3.11.5.1. Steroider og beslægtede forbindelser

De grundlæggende stamforbindelser her er  $5\alpha$ - og  $5\beta$ -gonan. Tabel 5 viser  $5\alpha$ -gonan. Den stereokemiske  $\alpha/\beta$ -notation (2.7.4.6) er af afgørende betydning i steroidnomenklaturen.

Fælles for steroiderne er et gennemhydrogeneret cyclopenta[*a*]phenanthrenskelet (jf. 2.3.5.2 og nummereringen af phenanthren, tabel 5), eventuelt med enkelte bindinger fjernet eller med ringe, der er kontraheret eller ekspanderet (jf. eksemplet i 1.3.6.6). Der kan være sidekæder, dog normalt højst dem, der er vist på figuren nedenfor. Disse nummereres som vist.



En række strukturer ud over gonan kan anvendes som stamforbindelser. Vi har til tabel 5 udvalgt estran, androstan, cholestan, cholans og pregnan. Eksempler fra *Kemiske Ord* på steroidnavne er estron, kolesterol, taurocholonsyre, ergocalciferol mfl.

Nærtbeslægtede strukturer kan fx afledes af stamhydriderne oleanan og abietan, der ligeledes er anført i tabel 5.

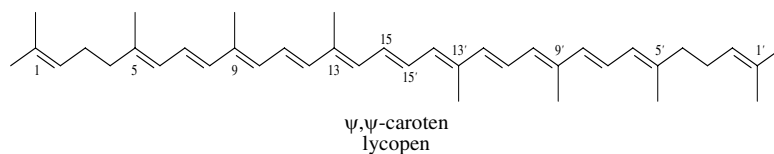
Et par specialiteter inden for steroidnomenklatur er brug af præfikset 'oxo', når en methylgruppe impliceret af stamnavnet udskiftes med en formylgruppe (3.3.2.5) og brug af suffikset 'syre' ved udskiftning af en impliceret methylgruppe med en carboxygruppe (3.3.2.7).

### 3.11.5.2. Terpener

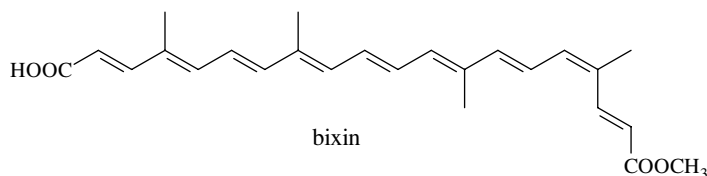
Stamhydriderne menthan, thujan, caran, pinan og bornan er vist i tabel 5 med deres standardnummerering. Ud fra disse kan dannes navne af typen bornan-2-on [campher (triv.)], pina-2(10),3-dien (jf. 2.3.1.2), *endo*-bornan-2-ol [borneol (triv.); jf. tabel 13, *endo*]. I 2.3.5.3 er vist, hvordan de fire bicykliske forbindelser også kan navngives efter von Baeyer-metoden. Denne kan generelt anvendes for beslægtede forbindelser. Området er nomenklaturmæssigt vanskeliggjort af de nu forældede nor-navne, der refererede til erstatning af *samlige* methylgrupper i caran, pinan og bornan med H.

### 3.11.5.3. Carotenoider

Disse polyumættede forbindelser, der kan tænkes opbygget ud fra isoprenenheder (isopren = 2-methylbuta-1,3-dien), har en særlig nomenklatur [6, s. 226-238], selv om de principielt kan navngives ud fra den almindelige systematiske nomenklatur for polyener. Den acykliske grundforbindelse er lycopen:



Andre kombinationer af græske bogstaver (β, ε, κ, φ, χ, ψ, jf. tabel 13) bruges for at betegne andre endegrupper på den samme lange midterkæde; med en 2,6,6-trimethylcyclohex-1-en-1-ylgruppe i stedet for lycopens 2,6-dimethylhepta-1,5-dien-1-ylgruppe i hver ende fås β,β-caroten (trivialnavn β-caroten). En række carotenoider, såvel rene carbonhydrider (carotener) som oxygenholdige derivater (xanthophyller), har etablerede trivialnavne, eksempelvis:





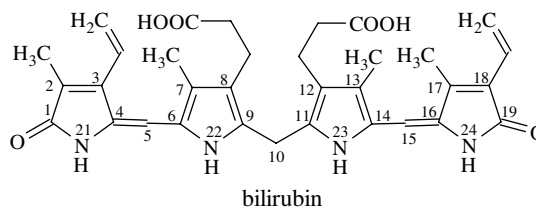
(Se systematiske navne i *Kemiske Ord*.)

Beslægtede forbindelser er retinoiderne [6, s. 247-251], repræsenteret ved retinol (se figuren allerførst i kap. 3).

#### 3.11.5.4. Tetrapyrroler

Ringsystemerne i hem og beslægtede forbindelser som chlorin, hematiner osv., som er vigtige i redoxaktive proteiner som hemoglobin og peroxidaser, er alle derivater af stamhydridet porfyrin (tabel 14D). Se de systematiske navne i *Kemiske Ord*. De beslægtede forbindelser corrin (tabel 14D) og cyclopenta[*at*]porfyrin (2.3.5.2) er grundlag for corrinoiderne [6, s. 272-277], hvortil hører vitamin B<sub>12</sub> og beslægtede forbindelser, og for chlorophyl.

Porfyrin indeholder fire pyrrolringe og tilhører klassen af tetrapyrrooler, hvis nomenklatur er udførligt behandlet af IUPAC [6, s. 278-329; 9, kap. 3]. Åbne tetrapyrrooler er fx stamhydridet bilan (tabel 14D) og den funktionelle stamforbindelse (2.8.2) bilirubin:



## 3.12. Isotopmodificerede forbindelser

Der kan være behov for at tilkendegive, at man for sig har et præparat af en vis kemisk forbindelse med en isotopfordeling forskellig fra den naturlige for ét eller flere af de indgående grundstoffers vedkommende. IUPAC skelner mellem *isotopsubstituerede forbindelser*, hvorved menes ensembler af formelenheder, hvori atomerne i bestemte positioner er fuldstændigt udskiftet med atomer af en bestemt isotop, mens de øvrige positioner bærer deres respektive atomer i naturlig isotopfordeling, og *isotopmærkede forbindelser*, som er ensembler, hvori kun nogle af enhederne har undergået en sådan udskiftning. En isotopmærket forbindelse kan formelt opfattes som fremkommet ved blanding af forbindelsen med den naturlige isotopforde-

ling med én eller flere isotopsubstituerede forbindelser. (Tilsammen kaldes isotopsubstitution og -mærkning for *isotopmodifikation*).

Vi demonstrerer her ved nogle få eksempler IUPAC's anbefalinger for formelskrivning og navngivning i simple tilfælde af isotopmodifikation; for de mere komplicerede tilfælde henvises til [2, s. 155-161] og [9, II-2].

### **Isotopsubstitution**

$\text{H}^{13}\text{CHO}$	( $^{13}\text{C}$ )formaldehyd
$\text{H}_2^{18}\text{O}$	( $^{18}\text{O}$ )vand
$^2\text{H}_2\text{O}$ , $\text{D}_2\text{O}$	( $^2\text{H}_2$ )vand, dideuteriumoxid
$\text{H}^2\text{HO}$ , $\text{DHO}$	( $^2\text{H}_1$ )vand, deuteriumhydroge- noxid
$^1\text{H}^2\text{HO}$	( $^1\text{H}^2\text{H}$ )vand, deuteriumprotiu- moxid
$(\text{C}^2\text{H}_3)_2\text{SO}$	di[( $^2\text{H}_3$ )methyl]sulfoxid
$(\text{CH}_2^2\text{H})_2\text{SO}$	di[( $^2\text{H}_1$ )methyl]sulfoxid
$\text{C}^2\text{H}_3\text{CH}_2\text{O}^2\text{H}$	(2,2,2- $^2\text{H}_3$ )ethan( $^2\text{H}$ )ol, ( <i>O</i> ,2,2,2- $^2\text{H}_4$ )ethanol
$\text{H}_2\text{N}(\text{HN})^{13}\text{CNH}(\text{CH}_2)_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$	(guanidino- $^{13}\text{C}$ )arginin, 2-amino-5-( $^{13}\text{C}$ -guanidino)pentansyre
$^{235}\text{UF}_6$	( $^{235}\text{U}$ )uranhexafluorid

*Bemærk:* kun hydrogen har særlige navne og bogstavsymboler for enkelte isotoper, jf. tabel 1. Navne og formler som de ovenfor viste med deuterium, D, kan der næppe rejses indvendinger imod, men de er ikke eksplicit anført hos IUPAC. Andre notationer end de her (ovenfor og nedenfor) viste og andre navne, såsom tungt vand, deuteriochloroform, dimethylsulfoxid- $d_6$ ,  $d_8$ -toluen osv. bør undgås eller i hvert fald i konteksten defineres ud fra et systematisk navn eller en formel som de her viste.

**Isotopmærkning***Uselektiv mærkning:*

$[^2\text{H}](\text{CH}_3)_2\text{SO}$ ,  $[^2\text{H}]\text{dimethylsulfoxid}$  [blanding af alle  $^2\text{H}$ -substituerede former af  $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$  med  $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$  med naturlig isotopfordeling, indeholder altså  $(\text{CH}_2^2\text{H})\text{SOCH}_3$ ,  $(\text{CH}_2^2\text{H})_2\text{SO}$ ,  $(\text{CH}^2\text{H}_2)\text{SOCH}_3$ , ...,  $(\text{C}^2\text{H}_3)_2\text{SO}$ ]

*Selektiv mærkning:*

$[^2\text{H}]\text{H}_2\text{O}$ ,  $[^2\text{H}]\text{vand}$  (om blanding af  $^2\text{H}_2\text{O}$  og  $\text{H}^2\text{HO}$  med  $\text{H}_2\text{O}$  med naturlig isotopfordeling)

$[O,2\text{-}^2\text{H}]\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $[O,2\text{-}^2\text{H}]\text{ethanol}$  [om blanding af  $(O\text{-}^2\text{H})\text{ethanol}$ ,  $(2\text{-}^2\text{H}_1)\text{ethanol}$ ,  $(O,2\text{-}^2\text{H}_2)\text{ethanol}$  osv. (ialt 7 isotopsubstituerede former) med ethanol med naturlig isotopfordeling]

*Specifik mærkning:*

$[^2\text{H}_2]\text{O}$ ,  $[^2\text{H}_2]\text{vand}$  (om dideuteriumoxid blandet med vand med naturlig isotopfordeling)

$(\text{CH}_2[^2\text{H}])_2\text{SO}$ ,  $\text{di}([^2\text{H}_1]\text{methyl})\text{sulfoxid}$  [om blanding af  $\text{di}([^2\text{H}_1]\text{methyl})\text{-sulfoxid}$  med  $\text{dimethylsulfoxid}$  med naturlig isotopfordeling]

$\text{CH}[^2\text{H}_2]\text{CH}_2\text{O}[^2\text{H}]$ ,  $[O,2,2\text{-}^2\text{H}_3]\text{ethanol}$  (om blanding af  $\text{CH}^2\text{H}_2\text{CH}_2\text{O}^2\text{H}$  med ethanol med det naturlige hydrogenisotopforhold)

$[\text{Co}(\text{H}_2[^{18}\text{O}])(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_3$ ,  $\text{pentaammin}[^{18}\text{O}]\text{aquacobalt}(3+)\text{perchlorat}$

## Litteratur

- [1] IUPAC, *Nomenclature of Organic Chemistry (1979 Edition, Sections A, B, C, D, E, F and H)*, Pergamon Press, Oxford, 1979.
- [2] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (Recommendations 1993)*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993.
- [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] IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (W. H. Powell): Revised Nomenclature for Radicals, Ions, Radical Ions and Related Species (IUPAC Recommendations 1993), *Pure Appl. Chem.* **65** (6) (1993) 1357-1455.
- [5] IUPAC, *Compendium of Macromolecular Nomenclature*, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. I skrivende stund (primo 2007) er dette kompendium under revision. Der er et antal mellemliggende publikationer om polymernomenklatur, som må opsøges på [www.iupac.org](http://www.iupac.org) under Recommendations.
- [6] IUBMB, *Biochemical Nomenclature and Related Documents – A Companion*, 2nd Edition, Portland Press, London, 1992.
- [7] IUBMB, *Enzyme Nomenclature (Recommendations 1992)*, Academic Press, San Diego, CA, 1992. Bogen er ikke udkommet siden, men databasen over enzymnavne med reaktionsskemaer og referencer og links opdateres løbende på [www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme](http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme).
- [8] IUPAC and IUBMB, Joint Commission on Biochemical Nomenclature (A.D. McNaught): Nomenclature of Carbohydrates (Recommendations 1996), *Pure Appl. Chem.* **68** (10) (1996) 1919-2008.
- [9] IUPAC, Commission on the Nomenclature of Inorganic Chemistry (J.A. McCleverty, N.G. Connelly): *Nomenclature of Inorganic Chemistry II (Recommendations 2000)*, Royal Society of Chemistry, 2001.
- [10] IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry (P.M. Giles, Jr): Revised Section F: Natural Products and Related Compounds (IUPAC Recommendations 1999), *Pure Appl. Chem.* **71** (4) (1999) 587-643.