



V. Rapić*

Nova nomenklatura (imenje) organskih spojeva

Godine 2023. Školska će knjiga objaviti izdanje pod naslovom "Vladimir Rapić, *Nomenklatura organskih spojeva*". Cilj ovoga napisa jest izvijestiti o sadržaju te knjižice, u kojoj je uporabljena nova nomenklatura organskih spojeva. Rečeni je priručnik namijenjen ponajprije studentima fakulteta na kojima se sluša kolegij Organska kemija, no mogao bi korisno poslužiti i nastavnicima kemije u srednjim školama. Knjižica će dobro doći i sveučilišnim nastavnicima koji se susreću s organskom kemijom, a da im ona nije matična disciplina.

No najprije nekoliko riječi o razvitku organskokemijske nomenklature.

Pravila predočena u prethodnim IUPAC-ovim dokumentima – *Plavoj knjizi (Blue Book 1979)*¹ i *Vodiču (Guide 1993)*² bila su usmjerena gradnji *nedvosmislenih imena* (engl. *unambiguous names*), jer su organski kemičari u to vrijeme smatrali nepotrebnim stvaranje *jedinstvenih imena* (engl. *unique names*).

Eksplוזija informacija posljednjih je desetljeća dovela ne samo do porasta broja organskih spojeva već i do otkrivanja novih razreda (vrsta) spojeva.

Postojeća se pravila ne mogu na jednostavan način odbaciti, i zauzeti proizvoljan stav o tvorbi jedinstvenih imena, što sigurno ne bi bilo prihvaćeno u kemijskom općinstvu.

Zato je IUPAC potaknuo izradu kraćih tekstova o njihovoj tvorbi, u kojima bi se na jasan način predložila *jedinstvena imena*, odn. *preferirana IUPAC-ova imena* (engl. *preferred IUPAC names, PIN*).

To je posebno važno u svjetlu činjenice da nova *Blue Book 2013*³ broji 1600 stranica, u čemu će se kemičari koji nisu stručnjaci za nomenklaturu vrlo teško snaći: ovdje je dodijeljeno 10 000 kemijskih imena za 6000 struktura!! Da bi se olakšalo snalaženje u tom moru podataka, IUPAC ima u planu izdavanje većeg broja vodiča za tvorbu *preferiranih imena*, s namjerom da budu razumljivi, a time i čitljivi za što veći broj kemičara. Jedno od takvih izdanja jest *Brief guide to the nomenclature of organic chemistry*.⁴

Imena izvedena prema prethodnim pravilima mogu se i zadržati, tim više što su uporabljena u svim novijim udžbenicima organske kemije, od kojih je danas dostupan prijevod knjige Wade, *Organska kemija*.⁵

Uz pravila za tvorbu PIN, *Guide 2022*⁴ sadržava i naputke za gradnju računalom generiranih imena, što uvelike olakšava (pogotovo nekemičarima) nalaženje *jedinstvenih imena*, a time i komunikaciju radi prodaje, kupovine i naručivanja organskih spojeva u komercijalne svrhe itd. Npr. γ -butirolakton može se, na osnovi sedam postojećih nomenklaturnih operacija, imenovati na isto toliko načina, pri čemu proizlaze i polutrivijalna (poluracionalna) imena, no PIN je u *potpunosti racionalno ime* – oksolan-2-on. Na sličan način *preferirano ime* jest oksolan, a ne uvriježeni tetrahidrofuran.

U novoj *Blue Book 2013*³ uvedene su mnoge izmjene, a ovdje spominjemo samo najvažnije:

- 1) što manje trivijalnih imena,
- 2) duljina lanca ima prednost pred nezasićenosti,
- 3) uporaba što više lokanata,
- 4) što više različitih zagrada { [()] },
- 5) što više multiplikacije na račun supstitucije.

Uz naprijed opisanu "opću" nomenklaturu organskih spojeva ovaj priručnik sadržava i *stereokemijsku nomenklaturu* obrađenu u V. poglavlju (koja se temelji na IUPAC-ovim preporukama iz 1996.⁶ i pravilima P-9 iz *Blue Book 2013*³) te VI. poglavlje posvećeno *nomenklaturi ugljikohidrata* (IUPAC-ove preporuke⁷ i pravila P-107³).

Organski se spojevi (primjereno njihovoj strukturi) mogu imenovati primjenom različitih nomenklaturnih operacija, odnosno primjenjuju se sljedeće vrste nomenklatura:

- 1) supstitucijska nomenklatura,
- 2) funkcijsko-razredna nomenklatura,
- 3) aditivna nomenklatura,
- 4) konjunktivna nomenklatura,
- 5) suptraktivna nomenklatura,
- 6) nomenklatura temeljena na pregrađivanju,
- 7) umnožna nomenklatura.

Daleko je najrasprostranjenija supstitucijska nomenklatura, u kojoj je ime sastavljeno od imena osnovnog hibrida (spoja) i supstituenta odn. karakteristične skupine (npr. 2-metilbutan ili etanol). Dosad se uz spomenuto imenovanje ravnopravno uporabljivala funkcijsko-razredna nomenklatura, no u *Blue Book 2013* njezin se udjel smanjuje.

Treba napomenuti da su u supstituentima prvospomenute nomenklature često uključeni fragmenti izvedeni prema konjunktivnoj odn. zamjenskoj nomenklaturi.

Valja uočiti da pravila za imenovanje organskih spojeva uključuju niz kriterija navedenih slijedom opadajućeg prioriteta. Tako su npr. u tablici 8.2. planiranog izdanja u supstitucijskoj nomenklaturi opisane vrste spojeva za odabir glavne skupine koja se navodi u sufiksu.

No postoji i općenitiji sustav za tvorbu sustavnog imena na temelju najseniornijeg osnovnoga (lančastog ili cikličkog) spoja, odabranog prema sljedećim kriterijima koji se razmatraju postupno do donošenja odluke:

Kriteriji za nalaženje najseniornijeg osnovnog spoja

- 1) sadržava najseniorniju (glavnu) skupinu,
- 2) sadržava najveći broj glavnih skupina,
- 3) sadržava seniorni heteroatom prioritarnim slijedom $O > S > N$,
- 4) ugljikovi su prsteni seniorniji od ugljikovih lanaca,
- 5) za *prstenove*: seniorniji heteroatom, više prstenova, više atoma, više heteroatoma,

* Dr. sc. Vladimir Rapić, red. prof. u mirovini
e-pošta: vladimir1rapic@gmail.com

- 6) za lance: više atoma, više heteroatoma,
- 7) najviše višestrukih, a potom dvostrukih veza,
- 8) niži lokanti za seniorne skupine,
- 9) niži lokanti za nezasićene i hidro-prefikse,
- 10) maksimalan broj supstituenata,
- 11) najniži slijed svih supstituenatskih lokanata,

- 12) najniži lokant supstituenta u slijedu navođenja,
- 13) ime koje započinje slovom bližim početku abecede.

N. B.: Kriteriji od 7) do 13) vrijede za *prstenove i lance*.

(Da bismo vizualizirali navedene kriterije, predočit ćemo ih primjerima uz mozebitne dodatne primjedbe i objašnjenja.)

Primjeri seniornosti osnovnih i supstituiranih spojeva

1)	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{H} \\ \\ \text{NH}_2 \end{array}$	sulfonska kiselina je seniornija od amino-skupine
	(1-aminoetoksi)metansulfonska kiselina	
2)	$\begin{array}{c} \text{HS}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{S H} \\ \\ \text{S H} \end{array}$	osnova s 2 karakteristične skupine je seniornija
	1-(2-sulfaniletoksi)etan-1,2-tiol	
3)	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{NH}-\text{CH}-\text{O}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	O je seniorniji od N
	3-(metilamino)-2-oksaetan	
4)	$\text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_4-\text{Cyclobutane}$	NOVO: ciklobutan je seniorniji od pentana!
	pentilciklobutan	

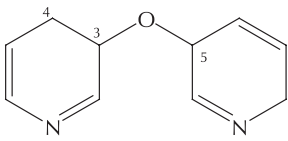
Kriteriji za cikličke spojeve

5) a)		O-prsten seniorniji je od S-prstena prema slijedu O > S > N
	2-(tietan-3-il)oksiran	
b)		biciklički je sustav seniorniji od monocikličkoga
	2-ciklopentilspiro[3.4]oktan	
c)		cikloheksan je seniorniji od ciklopentana
	ciklopentilcikloheksan	
d)		pirimidin s 2 dušikova atoma seniorniji je od piridina s jednim
	2-(piridin-4-il)pirimidin	
e)		prsten s O i N seniorniji je od onoga s dva N-atoma
	6-(piperazin-2-il)-1,3-oksazinan	

Kriteriji za acikličke spojeve

6)	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}=\text{CH}_2 \end{array}$	NOVO: 9-člani zasićeni lanac seniorniji je od 8-članog lanca s višestrukom vezom!
	4-etenilnonan	

Sljedeći se kriteriji uporabljaju za cikličke i acikličke spojeve

7)	$\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\overset{4}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{3}{\underset{\text{C}_2\text{H}_5}{\text{C}}}-\overset{2}{\text{C}}\text{H}=\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2$	odabrani 7-člani lanac sadrži veći broj višestrukih veza
	3-etilhept-1-en-5-in	
8)	$\text{H}_3\text{C}-\underset{\text{OH}}{\text{C}}\text{H}-\text{CH}_2-\text{O}-\overset{1}{\underset{\text{OH}}{\text{C}}}\text{H}-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\text{CH}_3$	propan-1-ol seniorniji je od propan-2-ola
	1-(2-hidroksipropoksi)propan-1-ol	
9)		niži lokanti za hidro-prefikse (ili nezasićenost)
	5-((3,4-dihidropiridin-3-il)oksi)-2,5-dihidropiridin	
10)	$\text{HO}-\underset{\text{CH}_3}{\text{C}}\text{H}-\text{O}-\overset{\text{Br}}{\underset{\text{Br}}{\text{C}}}-\text{CH}_2-\text{OH}$	osnova s tri supstituenta seniornija je od one s dva
	2-(1-hidroksietoksi)-2,2-dibrometan-1-ol	
11)	$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{Cl}}{\underset{\text{Cl}}{\text{C}}}\text{H}_2-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\text{O}-\overset{1}{\underset{\text{F}}{\text{C}}}\text{H}-\overset{2}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\text{Br}$	slijed 1, 1, 3 niži je od slijeda 1, 2, 2
	3-brom-1-(2,2-diklorpropoksi)-1-fluorpropan	
12)	$\text{Br}-\overset{1}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{2}{\underset{\text{Cl}}{\text{C}}}\text{H}-\overset{3}{\underset{\text{Br}}{\text{C}}}\text{H}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{Br}$	najniži supstituentni lokanti u slijedu navođenja: 1, 3, 2 niže je od 2, 3, 1
	1-brom-3-(1-brom-2-kloretil)-2-klorheksan	
13)	$\text{Br}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{Cl}$	ime bliže početku abecede
	brommetoksiklormetan	

Nakon što se odredi osnovni spoj, za njegovo imenovanje valja ga svrstati u odgovarajući razred (vrstu), a potom postupno primijeniti dolje navedene kriterije.

Numeriranje osnovnog spoja

- 1) najniži lokant(i) za heteroatome,
- 2) najniži lokant(i) za indicirani vodik,
- 3) najniži lokant(i) za glavnu karakterističnu skupinu,
- 4) najniži lokanti za oznake -en, -in i hidro-prefikse,
- 5) najniži lokanti za skup svih prefiksni supstituenta,
- 6) najniži lokanti za supstituente u slijedu navođenja.

N. B.: neki primjeri numeriranja prikazani su na gornjim formulama

ZAKLJUČNO: Najvažnije izmjene u *Blue Book 2013*³ su da pri izboru seniornijeg (osnovnog) spoja (1) ugljikovi prstenovi imaju prednost pred lancima, a (2) dulji zasićeni lanci pred kraćim nezasićenima, pa ta načela svakako valja primjenjivati u gradnji imena organskih spojeva.

Osim toga, ovdje se želi uvriježena (polu)trivijalna imena zamijeniti sustavnim *preferiranim IUPAC-ovim imenima* (PIN), što smatramo teško ostvarivim, s obzirom na vrlo zamršena i opsežna pravila (na 1600 str.); uz to, u recentnim udžbenicima iz organske kemije taj postupak nije primijenjen.

Literatura

1. Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A,B,C,D,E,F and H, International Union of Pure and Applied Chemistry, Pergamon Press, Oxford, 1979. i prijevod: IUPAC, *Nomenklatura organskih spojeva, sekcije A,B i C* (urednici prijevoda D. Škare i V. Rapić; preveli: M. Laćan, V. Rapić, D. Škare, M. Šuprina, J. Vorkapić-Furač, M. Vukićević) SKTH/Kemija u industriji, Zagreb, 1985; sekcije D,E,F i H (preveli: M. Šuprina, S. Kovač, M. Laćan) SKTH/Kemija u industriji, Zagreb, 1988.
2. A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (pripremili: R. Panico, W. H. Powell, J.-C. Richer), Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993, i prijevod: *Vodič kroz IUPAC-ovu nomenklaturu organskih spojeva*, preporuke HKD-a i HKDI-a 2001. (urednik prijevoda: V. Rapić; preveli: I. Bregovec, Š. Horvat, K. Majerski, V. Rapić), Školska knjiga, Zagreb, 2002.
3. Nomenclature of Organic Chemistry: IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013, RSC Publishing, 2014.
4. Brief guide to the nomenclature of organic compounds, Pure Appl. Chem. **92** (2022) 527–539.
5. L. G. Wade, ml., *Organska kemija* (7. izdanje), prijevod: O. Kronja, V. Rapić, I. Bregovec, Školska knjiga, Zagreb, 2017.
6. Basic Terminology of Stereochemistry, Pure Appl. Chem. **68** (1996) 2193–2222.
7. Nomenclature of Carbohydrates, Pure Appl. Chem. **68** (1996) 2919–2008 i prijevod: *Nomenklatura ugljikohidrata i glikolipida* (preveli: Š. Horvat, J. Horvat), sveučilišni priručnik HDKI/Kemija u industriji, Zagreb, 2001.