

Kemisk nomenklatur til kosmetik

Inden for kosmetik har man sin egen nomenklatur til kemiske stoffer. Med nogle eksempler illustreres det, hvordan den kosmetiske nomenklatur adskiller sig fra IUPAC-nomenklaturen.

Ud over en kemisk nomenklatur, som kan bruges til alle kemiske stoffer uanset deres anvendelsesområde, findes der også nomenklatur, som er beregnet til specifikke produkttyper. I det følgende vil et af disse "nomenklatorsystemer" blive illustreret med nogle eksempler og sammenlignet med IUPAC-nomenklaturen.

Formålet med IUPAC-nomenklaturen er, at man, baseret på en række regler, ud fra en veldefineret kemisk struktur kan tildele et entydigt systematisk navn og ud fra det systematiske navn entydigt kan fastslå strukturen [1]. Man kan navngive nye forbindelser baseret på disse regler.

Der findes nomenklatorsystemer, som er målrettet afgrænsede områder. Der er for eksempel International Nonproprietary Names for Pharmaceutical Substances (INN), som varetages af WHO [2], pesticidnavne, som tildeles af International Organization for Standardization [3], og navne på kosmetiske ingredienser (INCI-navne), som tildeles af International Cosmetic Ingredient Nomenclature Committee [4]. I disse tre systemer kan man ikke selv navngive nye stoffer/ingredienser, men skal søge om at få et stof navngivet.

Hvor IUPAC-navne oversættes til nationale sprog (i Danmark står Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg [5] for at yde vejledning til navngivning på dansk), så findes INN kun på latin, engelsk, fransk, spansk, russisk, arabisk og kinesisk. Pesticidnavne kan i princippet oversættes til alle sprog (på Nomenklaturudvalgets hjemmeside [5] kan man finde en række pesticidnavne på dansk ved at vælge prædikatet "pesticidnavn"). INCI-navne findes derimod kun på engelsk og oversættes ikke.

I EU reguleres kosmetik af kosmetikforordningen EC 1223/2009 [6]. Ifølge artikel 19 i forordningen skal kosmetik indeholde en liste over alle bestand-



dele, og i artikel 33 pålægges EU-Kommissionen at udarbejde et glossar med fælles betegnelser for bestanddele, hvor man skal skele til internationalt anerkendt nomenklatur, herunder INCI. Glossaret kom i 2019 (EU 2019/701) og blev i 2022 erstattet af et nyt [7]. Det er vigtigt at bemærke, at glossaret ikke er en positivliste over bestanddele, der kan anvendes i kosmetik - det er producentens ansvar, at produktet lever op til lovgivningen. Således må man godt bruge bestanddele, som ikke er i glossaret, hvis de ellers lever op til lovgivningen. Glossaret er i det store hele identisk med INCI. Ligesom INCI-navne oversættes glossaret ikke til nationale sprog og translittereres heller ikke til ikkelatinske alfabeter.

INCI dækker ikke kun veldefinerede kemiske stoffer, men også planteekstrakter, fermenter, polymerer, komplekse blandinger med videre. Selvom navngivningen ikke er strengt systematisk, føl-

ger den dog nogle konventioner [8], og betaler man for det, kan man på Personal Care Products Councils hjemmeside finde en definition af ingrediensen. Ved at registrere sig (hvilket er gratis) kan man få oplysninger som CAS-nummer og EC-nummer. Den information kan man dog også finde i EU-Kommissionens onlinedatabase [9], uden at man har registreret sig. Fordelen ved INCI-navne er, at de ofte er korte sammenlignet med systematiske kemiske navne, hvilket er en fordel, når alle bestanddele skal oplistes på produktet.

Ud over i kosmetik finder INCI-navne også anvendelse i detergenter (vaske- og opvaskemidler m.m.). Ifølge detergentforordningen [10] skal producenterne på et websted offentliggøre en liste over alle indholdsstoffer. INCI-navnene skal anvendes, og hvis et sådant ikke findes, skal navnet i den europæiske farmakopé anvendes. Hvis heller ikke det findes, "angives i stedet

det almindelige kemiske navn eller IUPAC-navnet”.

Konventionerne for tildeling af INCI-navne er delt op i generelle, specifikke og diverse. I alt er der 76 konventioner. Den første konvention indledes med ”Nomenclature assignments are based on the chemical composition of the intended product, and simple chemical names are used when possible”. For simple veldefinerede stoffer er INCI-navnet da ofte meget sigende, mens det for blandinger, polymerer mv. kræver lidt viden at udlede sammensætningen.

Det vil komme for vidt her at gennemgå konventionerne, men med nogle udvalgte eksempler kan man få en idé om, hvordan INCI-navne forholder sig til IUPAC-navne, og hvordan man i mange tilfælde ud fra navnet alene kan få en idé om stoffets struktur. I det følgende er INCI-navne skrevet i kursiv for at skelne dem fra IUPAC-navne.

Alkaner

Simple, rene alkaner hedder det samme i INCI- og IUPAC-nomenklatur (for eksempel *dodecane*). Blandinger af alkaner med samme antal carbonatomer hedder ”iso”, for eksempel *isododecane* (dem er der ikke så mange af i INCI). Tidligere hed blandinger af alkaner med forskelligt antal carbonatomer i INCI-terminologien isoparaffin, men hedder nu *isoalkane*. Et foranstillet ”Cx-y” angiver antallet af carbonatomer. *C14-16 isoalkane* er således forgrenede (og uforgrenede, men ikke cykliske) alkaner med 14-16 carbonatomer.

Carboxylsyrer og alkoholer

For fedtsyrer (carboxylsyrer med mindst seks carbonatomer) bruges de kendte ”trivialnavne”. Det gøres også for de afledte alkoholer. Således hedder det *lauric acid* og *lauryl alcohol* og ikke henholdsvis dodecansyre og dodecan-1-ol. Der er dog nogle undtagelser. For eksempel hedder det *caproic acid* (hexansyre), men *hexyl alcohol* og ikke caproyl alcohol, mens det hedder *caprylic acid* og *caprylyl alcohol*. Ligeledes hedder det *palmitic acid* (hexadecansyr), men *cetyl alcohol* og ikke palmityl alcohol.

Polyoxiran (polyethylenglycol) og alkylethoxylater

Polyethylenglycol (polyoxiran) er li-

neære polyethere med en fri OH-gruppe i hver ende. En eller begge af disse OH-grupper kan være alkylerede eller acylerede. Polyethylenglycol hedder i INCI *PEG-x* (polypropylenglycol hedder *PPG-x*), hvor x er polymerisationsgraden (antallet af monomerer). *PEG-6* har ifølge [4] CAS-numrene 25322-68-3 og 2615-15-8, hvor 25322-68-3 er generisk for alle polyethylenglycoler, mens 2615-15-8 er specifik for den bestående af seks monomerer; et systematisk navn for denne er 3,6,9,12,15-pentaoxaheptadecan-1,17-diol, hvor navngivningen tager udgangspunkt i heptadecan med fem af carbonatomerne erstattet af oxygen. Det er dog ikke helt beskrivende at bruge det specifikke CAS-nummer, da *PEG-6* ikke er et rent stof, men består af en blanding af forskellige kædelængder med en gennemsnitlig længde på seks monomerer.

Når det drejer sig om ethoxylerede alkoholer, tilføjes endelsen ”eth”. *Lau-reth-4* er således dodecanol ethoxylet med gennemsnitligt fire mol oxiran; IUPAC-navnet for denne er 3,6,9,12-tetraoxatetracosan-1-ol. Hvis det er en blanding af alkoholer med forskellige kædelængder, der er ethoxylet, bruges betegnelsen *Cx-y alketh-z*. *C9-11 alketh-2* er således C9-, C10- og C11-alkoholer med en gennemsnitlig ethoxylingsgrad på to (tidligere anvendtes betegnelsen *pareth*).

Hvis et stof både er ethoxylet og propoxylet, kan det ske ved, at man 1) først ethoxylet og derefter propoxylet, 2) først propoxylet og dernæst ethoxylet eller 3) ethoxylet og propoxylet samtidigt. I de to første tilfælde fås blokcopolymerer, mens der i det sidste tilfælde opnås en tilfældig polymer. INCI tager højde for dette: *PEG/PPG-x/y* betyder, at stoffet ethoxyles og propoxyles samtidigt, hvorimod *PPG-x PEG-y* betyder, at stoffet først er ethoxylet med y mol oxiran og derefter propoxylet med x mol methyloxiran.

Ethylhexyl stearate

INCI-navnet *ethylhexyl stearate* mangler nogle oplysninger for, at man kan fastslå den specifikke struktur. Stearate er octadecanoat, men med ethylhexyl mangler der oplysninger om, hvor ethylgruppen sidder på hexylkæden. Sidder den i 2-, 3- eller 4-stilling? Her hjælper det at vide noget om fremstillingsprocessen. Alkoholen i *ethylhexyl*

stearate er en såkaldt Guerbet-alkohol, hvor to mol butan-1-ol kondenserer til et mol 2-ethylhexan-1-ol. Men det efterlader stadig et problem med stereokemien, da C-2 i ethylhexyl er et asymmetrisk carbonatom, og der dermed kan være tale om to isomerer (*R/S*). Her hjælper det at vide, at Guerbet-reaktionen ikke er stereospecifik, og at der således dannes en racemisk blanding med lige meget af de to former. Det systematiske IUPAC-navn (på dansk er således (*rac*)-2-ethylhexyl(octadecanoat). På samme vis findes der også (2-)propylheptyl (fra pentan-1-ol) og (2-)butyloctyl (fra hexan-1-ol). På trods af det kemisk set ufuldstændige INCI-navn viser det sig alligevel at være entydigt, når man kender konteksten (CAS-nummeret er ifølge [4] og [9] 22047-49-0, som netop er 2-ethylhexyl(stearat)).

INCI bruges både af folk, der arbejder professionelt med kosmetik, og af forbrugere. For begge grupper er den præcise kemiske navngivning formodentlig af mindre betydning. Folk, der formulerer kosmetik, er sikkert mere interesserede i råvarens egenskaber end i dens systematiske kemiske navn. For den gennemsnitlige forbruger giver hverken et IUPAC- eller et INCI-navn formodentlig meget mening; for den nysgerrige forbruger er det vigtigere at kunne slå stoffet op. Her er et veletableret entydigt INCI-navn nemmere at slå op end et kemisk navn, hvor ét stof kan optræde med flere navne (systematisk, semisystematisk og trivial).

*Alan Mortensen,
Nomenklaturudvalget*

Referencer

- <https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/>.
- www.who.int/teams/health-product-and-policy-standards/inn/.
- www.iso.org/committee/50160.html.
- www.personalcarecouncil.org/resources/inci/.
- <https://kemisknomenklatur.dk/>.
- <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A02009R1223-20230816>.
- <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DA/TXT/?uri=celex%3A32022D0677>.
- <https://www.personalcarecouncil.org/resources/inci/background-information/>.
- <https://ec.europa.eu/growth/tools-databases/cosing/>.
- <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A02004R0648-20150601>.