

Der er forskel på thioler og thioier

I den interessante artikel om polycykliske carbon-hydrider i aprilnummeret af dette blad [1] omtaltes en femleddet ring med to svovlatomer under navnet 1,3-dithiol. Studsede nogen læsere over det?

Ofte ser man systematiske navne indeholdende suffikset 'thiol', der jo betegner substituenten –SH, svarende til 'ol' for en hydroxygruppe, –OH. Det skal vel at mærke være en forbindelse, hvori gruppen –SH er den højest rangerende karakteristiske gruppe (funktionelle gruppe); rangerer en anden gruppe højere, må –SH finde sig i at blive specificeret med præfikset 'sulfanyl' (*ikke mercapto!*).

Hantzsch-Widman-nomenklatur

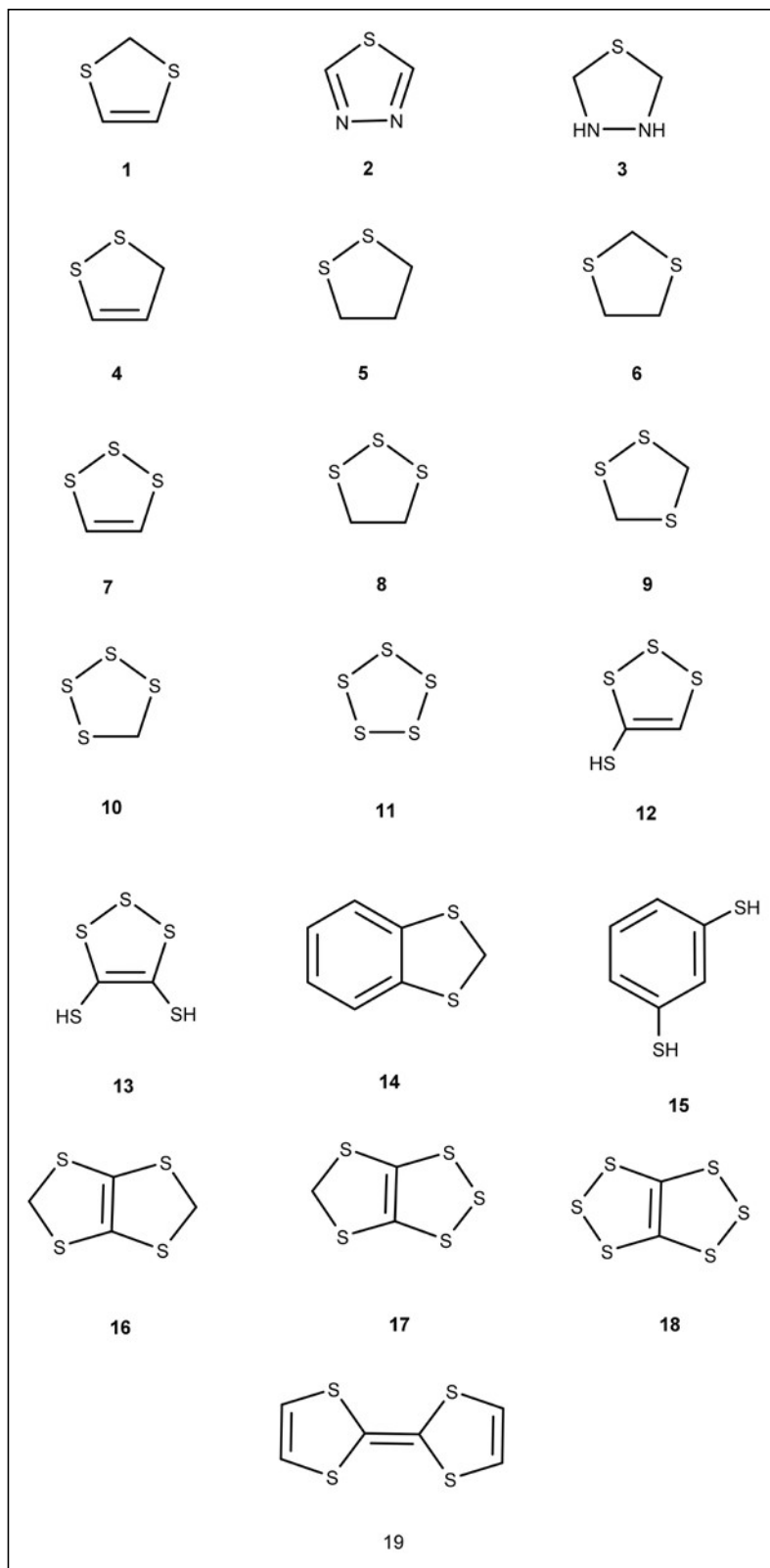
Men altså: 1,3-dithiol? Det er et fuldstændig korrekt navn for forbindelsen vist som nr. 1 i figur 1, dannet ud fra reglerne i *Hantzsch-Widman-nomenklatur*. Og hvad er så *det*? En kort introduktion kan læses i den danske oversættelse af IUPACs *Brief Guide* om organisk-kemisk nomenklatur, som ligger på Nomenklaturudvalgets hjemmeside [2]. Den lange historie kan læses i den seneste IUPAC-vejledning [3], som igen bygger på [4]. Kemikerne Hantzsch og Widman fortjener vist nok omtale af andre grunde end deres forslag til navngivning af heteromonocykler (ja, sådan må disse strukturer hedde), men historien siden deres artikler i 1887 og 1888 er lang og knudret, og læseren kan fornøje sig med at læse i [4] eller [5].

H-W-systemet består i dag kort fortalt i, at man til navngivning af et ringsystem med heteroatomer anvender

- *præfiks(er)*, der tilkendegiver, hvilke heteroatomer der er til stede i ringen, om fornødent forsynet med multiplikatorer (di, tri osv.) og tallokanter;
- en *stamme*, der specificerer, hvilken ringstørrelse der er tale om, og graden af umættethed.

Systemet anvendes for 3- til 10-leddede ringe.

Eksempel: Navnet 1,3,4-thiadiazol udsiger, at der i en maksimalt umættet femleddet ring (tilkendegivet ved *stammen* 'ol') er ét svovlatom (*præfikset* 'thia') og to nitrogenatomer (multiplikatoren 'di' og *præfikset* 'aza', her forkortet til 'az' på grund af sammenstødet med o'et i stammen). Tallokanterne 1,3,4 angiver placeringen i ringen af heteroatomerne. Se strukturen



Figur 1. Udvalgte thiolstrukturer kommenteret i artiklen.

1. 1,3-dithiol. 2. 1,3,4-thiadiazol. 3. 1,3,4-thiadiazolidin.
4. 1,2-dithiol. 5. 1,2-dithiolan. 6. 1,3-dithiolan.
7. trithiol. 8. 1,2,3-trithiolan. 9. 1,2,4-trithiolan.
10. 1,2,3,4-tetrathiolan (eller bare tetrathiolan).
11. pentathiolan eller cyclo-pentasvovl. 12. trithiolthiol.
13. trithioldithiol. 14. 1,3-benzodithiol. 15. benzen-1,3-dithiol.
16. [1,3]dithiolo[4,5-d][1,3]dithiol.
17. [1,3]dithiolo[4,5-d][1,2,3]trithiol. 18. [1,2,3]trithiolo[4,5-d][1,2,3]trithiol (eller bare trithiolotrithiol?).
19. 2,2'-bi(1,3-dithiol-2-yliden) (tetrathiafulvalen).

i figur 1 (nr. 2). Den tilsvarende mættede forbindelse ville have stammen 'olidin' og altså hedde 1,3,4-thiadiazolidin (nr. 3).

Det er meget kompakte og elegante navne, men man skal kende koden.

Det ejendommelige i IUPACs beskrivelse af H-W-systemet er nu, at det første, der møder læseren, er en opremsning af en lang række velkendte heteromonocykliske forbindelser, hvis konventionelle navne – *der ikke er konstrueret ud fra H-W-reglerne* – ikke bare accepteres, men er de **foretrukne IUPAC-navne** (PIN). Vi nævner dem her, men bruger ikke plads på at tegne dem:

furan, imidazol, imidazolidin, morpholin, piperazin, piperidin, pyran, pyrazin, pyrazol, pyrazolidin, pyridazin, pyridin, pyrimidin, pyrrol, pyrrolidin, selenophen, tellurophen og thiophen.

Man bemærker specielt, at furan og pyran trods endelsen 'an' er umættede forbindelser.

Kan det gå galt?

Enhver nomenklaturists værste mareridt er, at man har lavet regler for systematiske navne, som fører til tvetydige navne. Lad os se på thiol.

For femleddede ringe med to eller flere svovlatomer er H-W-stammen 'ol', hvis de er umættede, og 'olan', hvis de er mættede; der bliver så mulighed for to dithioler og to dithiolaner; en trithiol og to trithiolaner; en tetrathiolan; og

en pentathiolan. De er alle vist i figur 1. Den sidste er ikke mere en organisk forbindelse og kunne efter uorganiske regler også kaldes *cyclo*-pentasvovl. Og vi kom forbi 1,3-dithiol, som vi nævnte i indledningen. Den maksimalt umættede femleddede ring med ét svovlatom kunne efter H-W kort og godt hedde thiol, et navn, der imidlertid ikke spildes ord på hos IUPAC; den hedder simpelthen thiophen og var med i undtagelseslisten ovenfor.

Men der kan laves mere sjov med thiol. Der er to ledige substituérbare hydrogenatomer i trithiol. Hvis de erstattes med hhv. én og to –SH-grupper, fås forbindelserne trithiolthiol og trithioldithiol. Det ser vanvittigt ud, men er korrekt nok; da der ikke er tvivl om, hvor svovlatomerne og substituenterne kan sidde, er tallokanter ikke nødvendige.

Ringe kan anneleres (fusioneres). En særlig navnetype anvendes for ringe sat sammen med en benzenring; anneleres 1,3-dithiol således til en benzenring, hedder forbindelsen 1,3-benzodithiol. Det er faretruende tæt på benzen-1,3-dithiol (som tidligere ovenikøbet hed 1,3-benzendithiol). Se igen figur 1.

Man kan annelere 1,3-dithiol til 1,3-dithiol; 1,3-dithiol til trithiol; og trithiol til trithiol. Navnene [1,3]dithiolo[4,5-*d*][1,3]dithiol; [1,3]dithiolo[4,5-*d*][1,2,3]trithiol og [1,2,3]trithiolo[4,5-*d*][1,2,3]trithiol er konstrueret med alle tallokanter efter reglerne

for fusionsnavne og med det vigtige 'o' sat efter navnet på førstekomponenten. Hvis man var lidt fræk, kunne man sige om det sidste navn, at lokanter er overflødige, da der kun er én mulig forbindelse, som så simpelthen kunne hedde trithiolotrithiol. Der synes ikke at være en eksplicit regel, som taler for eller imod et navn som dette.

En anden måde at sætte dithiolringe sammen på er de Bechgaardske forbindelser med det folkelige navn tetrathiafulvalener, som også optrådte i [1]; IUPAC-navnet 2,2'-bi(1,3-dithiol-2-yliden) tager højde for dobbeltbindingen mellem de to ringe (figur 1 nr. 19).

Vi var forbi overraskende navne her, og selv om det var tæt på, gik det ikke så galt, at reglerne førte til tvetydige navne. Men kan det ske?

TD, Nomenklaturudvalget

Referencer

1. **M.B. Nielsen:** Polycykliske aromatiske kulbrinter – multi-redox systemer. *Dansk Kemi* **107** # 2 (2026) 20-23.
2. https://kemisknomenklatur.dk/pdf/Organic_Brief_Guide.pdf.
3. *Nomenclature of Organic Chemistry. IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013.* Bekvem og opdateret online-version her: <https://iupac.qmul.ac.uk/BlueBook/PDF> (se afsnit P-22.2).
4. **W.H. Powell:** Revision of the extended Hantzsch-Widman system of nomenclature for heteromonocycles. *Pure Appl. Chem.* **55** (1983) 409-416.
5. https://en.wikipedia.org/wiki/Hantzsch-Widman_nomenclature (besøgt 11/6-2026).

LabDays
Stand
44

PRÆCISION TIL DIT LABORATORIUM

Besøg Drifton og DACOS på LabDays, og oplev pumper, laboratorieudstyr og laboratorieforbrugsvarer til forskning, pharma, diagnostik og kvalitetskontrol.

Vi glæder os til at møde dig på stand 44.



Besøg drifton.dk, eller kontakt os på 3679 0000 eller info@drifton.dk