

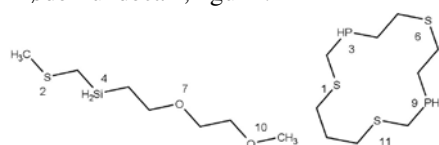
Grundstofnavnene i arbejde for kemien. III.

Af Ture Damhus

I de to første artikler beskæftigede vi os med støkiometriske navne [1] og stamhydridnavne [2]. Vi skal nu se på yderligere anvendelser af grundstofnavnene, hvor de bliver mishandlet på det groveste, men stadig kan genkendes. Som sædvanlig har vi en tabel med udvalgte grundstofeksempler, tabel 1. Vi skal se på *udskiftningsnomenklatur*, *Hantzsch-Widman-systemet* og *nodalnomenklatur*.

Udskiftningsnomenklatur [4]

Carbonatomerne i kæder og ringe kan udskiftes med heteroatomer. En meget generel teknik ved navngivning af sådanne afledte forbindelser gør brug af 'a'-formerne af grundstofnavnene som ses i tabel 1. Figur 1 viser nogle eksempler, som vist forklarer sig selv. (Men for at lave navnene skal man vide, at nummereringerne af skeletatomerne vælges, så man får det leksikografisk laveste samlede talsæt, og at 'a'-præfikserne derefter ordnes efter periodesystemet "læst bagfra", altså ikke alfabetisk). For kæder har IUPAC besluttet, at man skal op på fire heteroatomer, før man begynder at bruge 'a'-formerne. Jeg skal ikke her forsøge at forsvare den beslutning, som jeg ikke har haft nogen indflydelse på, men det betyder i hvert fald, at det ikke er muligt med smarte løsninger som at kalde diethylether for 3-oxapentane, dimethyldisulfid for 2,3-dithiabutan eller hexamethylen-diamin for 1,8-diazaoctan. De systematiske navne for disse tre forbindelser er hhv. ethoxyethan, (methyldisulfanyl)methan og hexan-1,2-diamin; der anvendes altså her forskellige andre procedurer inden for organisk nomenklatur. På dette punkt var vi desværre lidt for friske i den oprindelige *Kemisk Ordbog* [5]. – Det afsluttende 'a' i præfikserne fjernes ikke ved vokalsammenstød, altså for eksempel når 'sila' møder 'undecan', figur 1.



Figur 1. Til venstre 7,10-dioxo-2-thia-4-sila-undecan, til højre 1,6,11-trithia-3,9-diphosphacyclotetradecan.

	Grundstofnavn	Andet navn	a-præfiks	y-fragment
Al	aluminium		alum(in)a ²⁾	aluminy
Sb	antimon	stibium (latin)	stiba	stiby
As	arsen		arsa	arsy
Bi	bismuth		bisma	bismy
Pb	bly	plumbum (latin)	plumba	plumby
B	bor		bora	bory
Br	brom		broma	bromy
C	carbon	kulstof ³⁾	carba ⁴⁾	carby
Cl	chlor		chlora	chlory
F	fluor		fluora	fluory
Ga	gallium		galla	gally
Ge	germanium		germa	germy
In	indium		inda/indiga ⁵⁾	indy
I	iod		ioda	iody
N	nitrogen	azote (fransk); kvælstof ³⁾ (om dinitrogen, N ₂)	aza	azy
O	oxygen	ilt ³⁾ (om dioxygen, O ₂)	oxa	oxy
P	phosphor		phospha	phosphy
Se	selen		selena	seleny
Si	silicium		sila	sily
S	svovl	sulfur (latin); theion (græsk)	thia	sulfy
Te	tellur		tellura	tellury
Tl	thallium		thalla	thalla
Sn	tin	stannum (latin)	stanna	stanny

1) Samtlige sådanne præfikser og fragmenter kan ses i *Red Book 2005* (3), Table X.
2) I udskiftningsnomenklatur anvendes 'alumina', i H-W anvendes 'alumina'. Dette fremgår ikke i (3).
3) Trivialnavn.
4) Anvendes i særlige tilfælde, når andre atomer erstattes med carbon, fx i polyboranomenklatur.
5) I udskiftningsnomenklatur anvendes 'inda', i H-W anvendes 'indiga'. Dette fremgår ikke i (3).

Tabel 1. Udvalgte grundstofnavne og tilhørende præfikser og fragmenter til udskiftningsnomenklatur, Hantzsch-Widman-navne og nodalnomenklatur.¹⁾

Hantzsch-Widman-systemet

For ringe anvendes teknikken ovenfor kun ved ringe med flere end ti skeletatomer. For mindre heterocykler findes der et system, som har over hundrede år på bagen, men er blevet revideret og forfinet flere gange siden: *Hantzsch-Widman-nomenklatur* [4]. Nogle vil muligvis mene, at det har de aldrig hørt om, men almindelige navne som dioxin og thiazol er faktisk dannet inden for dette system, som vi nu ser nærmere på.

Ideen er, at man bruger a-formerne af

grundstofnavnene, tabel 1, til at betegne heteroatomer og en endelse (som sjovt nok kaldes 'stem' på engelsk) til at vise ringstørrelsen og om forbindelsen er mættet eller maksimalt umættet, se tabel 2.

Så for eksempel: man vil have et svovlatom og et phosphoratom i en mættet seksring i positionerne 1 og 3; det bliver til 1-thia-3-phosphanan. Man bemærker, at 'a' i 'phospha' her forsvinder ved sammenstød med endelsen 'inan'. Det er generelt i H-W, at ved vokalsammenstød forsvinder den første.

Ringstørrelse	Maksimalt umættet	Mættet
3	iren ¹⁾ / irin ²⁾	iran ¹⁾ / iridin ²⁾
4	et	etan ¹⁾ / etidin ²⁾
5	ol	olan ¹⁾ / olidin ²⁾
6	in ³⁾ / inin ⁴⁾	an ⁵⁾ / inan ⁶⁾
7	epin	epan
8	ocin	ocan
9	onin	onan
10	ecin	ecan

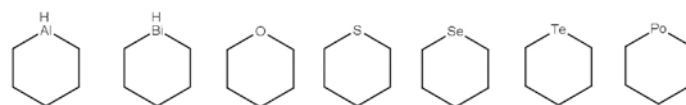
- 1) Anvendes for ringe uden nitrogen.
- 2) Anvendes for ringe indeholdende nitrogen.
- 3) Anvendes, når det sidst anførte præfiks i navnet repræsenterer O, S, Se, Te, N, Bi, Si, Ge, Sn eller Pb.
- 4) Anvendes, når det sidst anførte præfiks i navnet repræsenterer F, Cl, Br, I, P, As, Sb, B, Al, Ga, In eller Tl.
- 5) Anvendes, når det sidst anførte præfiks i navnet repræsenterer O, S, Se, Te eller Bi.
- 6) Anvendes, når det sidst anførte præfiks i navnet repræsenterer N, P, As, Sb, Si, Ge, Sn, Pb, F, Cl, Br, I, B, Al, Ga, In eller Tl.

Tabel 2. Endelser ('stems') til brug i Hantzsch-Widman-nomenklatur.

Den tilsvarende maksimalt umættede forbindelse ville hedde 1-thia-3-phosphinin.

Rækkefølgen, hvori heteroatompræfikserne anføres i H-W-navne, er oxa < thia < seleno < telluro < aza < phospho < arsa < stiba < bisma < sila < germa < stanna < plumba < bora < alumina < galla < indiga < thalla, hvor '<' betyder 'kommer før' (læst fra venstre).

Vi lovede i [2] at vende tilbage til de mættede seksringe, hvis H-W-navne gjorde det lidt besværligt at navngive tilsvarende binære stamhydrider. De er vist i figur 2.



Figur 2. H-W-navne for nogle mættede seksringe. Fra venstre er det aluminan, bismen, oxan, thian, selenan, telluran og, for fuldstændighedens skyld, polonan. Sml. stamhydriderne aluman, bismuthan, oxidan, sulfan, selan, tellan og polan [2].

Et kort kursus i H-W vil derefter være at studere figurerne 3, 5, 6 og 7. Figur 4 viser eksempler på, at traditionen af og til sejrer over rationaliteten. Se figurerne på næste side.

Kæder og ringe nok en gang

I princippet kan kæder og ringe med heteroatomer navngives ved metoderne omtalt ovenfor. Men jo flere heteroatomer, des mere kunstigt føles det at navngive ud fra carbonbaserede stamhydrider. Når alt carbon er udskiftet, har vi en rent uorganisk forbindelse. I sådanne er det ofte også kunstigt at opretholde en konvention om klart definerede enkelt-, dobbelt- og tripelbindinger. De indgående grundstoffer har ofte ikke de standardvalenser, som den organiske nomenklatur er baseret på. Endelig får man hurtigt brug for at navngive systemer med adskillige ringe, der på kompliceret vis er sat sammen med hinanden. Et helt generelt system til navngivning af sådanne strukturer er *nodalnomen-*



TIL INDUSTRIELLE OG KLINISKE
MIKROBIOLOGISKE LABORATORIER

KVALITETSPRODUKTER FRA



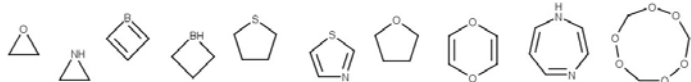
Mød os på
DiaLabXpo
stand 3042



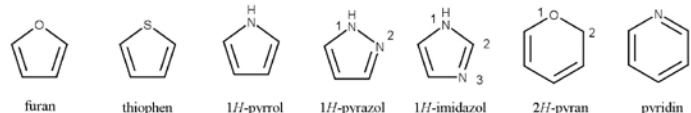
SSI Diagnostica A/S
Herredsvejen 2
3400 Hillerød
T 4829 9100

ssidiagnostica.com

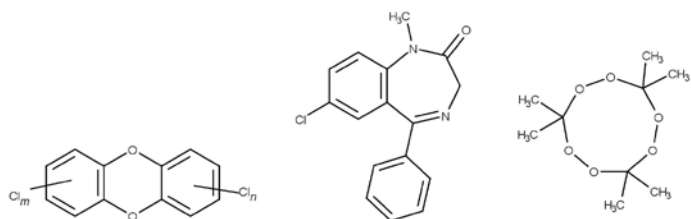
klatur [3, afsnit IR-7.4]. Her ansues en kæde eller ring, eller et system af flere (evt. forgrenede) kæder og/eller ringe, i bedste matematikerstil som en *graf*, der specificeres ved hjælp af en grafteoretisk deskriptor, og når den først er på plads, nævner man simpelthen alle atomer med deres positioner og ved brug af 'y'-fragmenterne fra tabel 1. Til sidst anføres vha. 'catena' og/eller 'cyclus' (engelsk 'cycle'), hvor mange kæder og ringe der indgår. (Grafens hjørner eller knudepunkter er *nodes* på engelsk, deraf *nodal nomenclature* og *nodal descriptor*).



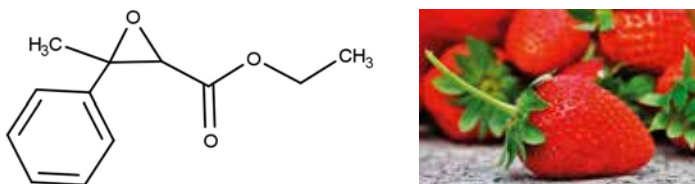
Figur 3. **Andre stamhydrider med H-W-navne.** Fra venstre er det oxiran, aziridin, boret, boretan, thiolan, 1,3-thiazol, oxolan, 1,4-dioxin, 1,4-diazepin og 1,2,4,5,7,8-hexoxonan. De to første hedder naturligvis altid ethylenoxid og ethylenimin i daglig tale, men disse navne kan ikke bruges til afledninger (se figur 6 for et oxiranderivat). Fireleddede ringe er nok sjældnere end de andre; eksemplerne her er medtaget for at advare læseren om navnenes lidt usædvanlige udseende (boret, silet, azet, thiet osv.). De tre sidste er blandt andet kendt fra forbindelserne vist i figur 5.



Figur 4. **Stædige overleverer.** Disse heterocykler (og enkelte andre) har bibeholdt deres klassiske navne, også som de foretrukne stamhydridnavne. Nogle af dem udviser principielt tautomeri og er derfor forsynet med *indiceret hydrogen*. Fra venstre ville H-W-navnene være: oxol, thiol, 1H-azol, 1H-1,2-diazol, 1H-1,3-diazol, 2H-oxin og azin. To af disse ville have været ubekvemme: 'thiol' er et generelt suffiks for gruppen -SH, og 'oxin' er trivialnavn for kompleksdanneren quinolin-8-ol. Navnene furan og pyran generer til gengæld systematikere, fordi 'an' almindeligvis signalerer mættethed.

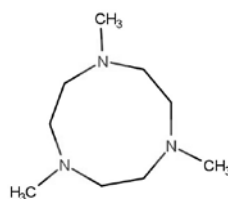


Figur 5. **Kendte forbindelser med H-W-navne.** Til venstre: de polychlorederede dibenzo[1,4]dioxiner kaldes under ét ofte blot 'dioxin' og er meget omtalt i miljødebatten. I midten: benzodiazepiner er en gruppe lægemiddelstoffer, der bruges blandt andet som sovemidler; det viste eksempel er diazepam, kendt fra præparater som Valium og Stesolid og med det systematiske navn 7-chlor-1-methyl-5-phenyl-1,3-dihydro-2H-1,4-benzodiazepin-2-on. Endelig, til højre, ses 3,3,6,6,9,9-hexamethyl-1,2,4,5,7,8-hexoxonan, bedre kendt som det eksplosive triacetonetriperoxid (TATP).



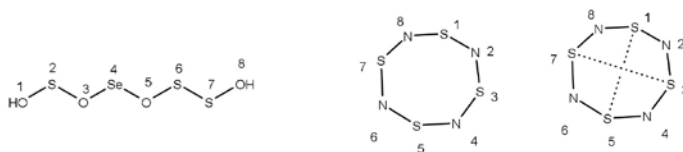
Figur 6. **Der er en duft af** Treleddede ringe er ikke så usædvanlige endda. Det her er en syntetisk forbindelse med det noget vildledende trivialnavn *jordbæraldehyd*. Den systematiske navn, 3-methyl-3-phenyloxiran-2-carboxylsyreethylester, er baseret på stamhydridet oxiran, fordi dette bærer den primære karakteristiske gruppe (hovedfunktionen). Forbindelsen dufter af jordbær og anvendes både i parfumerivarer og i fødevarer.

Nodalnomenklatur er altså karakteriseret ved, at en struktur bygges op helt fra grunden. Nogle atomer eller atomgrupper kan betragtes som ligander og navngives som sådanne ligesom i koordinationsnomenklatur, som vi stadig skubber foran os til en senere artikel. Der skal selvfølgelig nogle regler til om,



Figur 7. **Er der H-W i din opvask?** Måske.

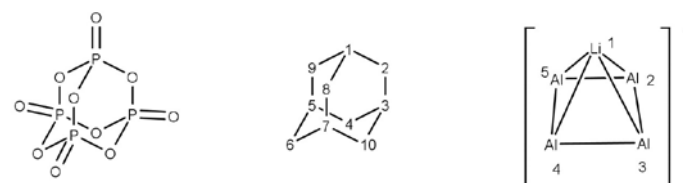
Molekylet øverst har, som læseren kan overbevise sig om ved at tjekke tabel 1 og 2, H-W-navnet 1,4,7-trimethyl-1,4,7-triazonan, men bliver oftest kaldt trimethyltriazacyclononan eller blot TACN. Et tokenet mangankompleks indeholdende denne ligand, $[\text{Mn}^{\text{IV}}_2(\text{O})_3(\text{TACN})_2](\text{PF}_6)_2$, har trukket et dramatisk spor efter sig i (op)vaskemiddelindustrien, som beskrevet i [6,7]. Men det er endt med, at selskabet kompleks nu er et standardprodukt kendt under "navnet" MnTACN og forekommer i maskinopvasketabletter på markedet [8,9]. Vi vender tilbage til kompleksets fulde navn senere.



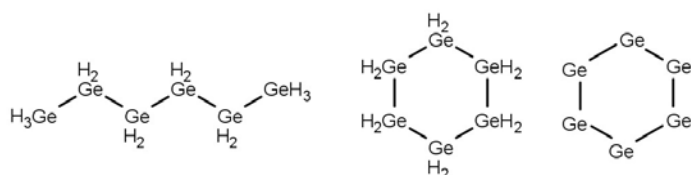
Figur 8. Til venstre 1,8-dihydrido-1,3,5,8-tetraoxy-4-seleny-2,6,7-trisulfy-[8]catena.

Dernæst to præsentationer af tetrasvovltetranitrid (som i sig selv jo blot er et støkiometrisk navn, jf. [1]).

I midten 2,4,6,8-tetraazy-1,3,5,7-tetrasulfy-[8]cyclus. Hvis man vil tilkendegive S-S-bindingerne (se for eksempel diskussion i [10]), skal der en ny nodaldeskriptor til, og navnet bliver 2,4,6,8-tetraazy-1,3,5,7-tetrasulfy-[08.01.503.7]tricyclus. Navnet på kationen $\text{S}_4\text{N}_4^{2+}$ ville ende på cyclium(2+). Forbindelsen $\text{S}_4\text{N}_4\text{H}_4$ med et hydrogenatom på hvert nitrogen (ikke vist) kan klares med H-W: 1,3,5,7-tetrathia-2,4,6,8-tetrazocan.



Figur 9. **Polycykliske systemer.** Vi omtalte phosphor(V)oxid i [1, del 2], et navn, der ikke siger noget om den molekylære struktur, som er vist her. En mulighed er at navngive molekylet med nodalnomenklatur som 1,3,5,7-tetraoxido-2,4,6,8,9,10-hexaoxy-1,3,5,7-tetraphosphy-[08.11.513.7]tricyclus. Nummereringen er vist på skelettet i midten. Faktisk kan det skelet også opfattes som repræsenterende stamhydridet adamantan, hvorved man med udskiftningsnomenklatur ville nå frem til navnet 2,4,6,8,9,10-hexaoxa-1λ⁵,3λ⁵,5λ⁵,7λ⁵-tetraphosphaadamantan-1,3,5,7-tetron. Adamantan selv kan inden for den organiske nomenklatur navngives som det tricykliske system, det er, ved hjælp af *von Baeyer-nomenklatur*, men herom en anden gang. Den særegne anion til højre kan navngives 2,3,4,5-tetraaluminy-1-lithy-[05.01.301.402.5]tetracyclat(1-). Læsere, der mener at have et bedre navn, som stadig afspejler topologien i molekylet, bedes henvende sig!



Figur 10. **Germanske stamforbindelser.** Til venstre hexagerman (ordinært navn for binært stamhydrid [2]), i midten hexagerminan (H-W). Navngivning med nodalnomenklatur ville være lige ud ad landevejen for begge, men give lange navne på grund af de mange hydrogenatomer. (Man kunne overveje en regel om at underforstå dem). Til gengæld er den sikkert usandsynlige tingest til højre ligetil: 1,2,3,4,5,6-hexagermy-[6]cyclus, hvor stam"hydrid"-navnet ville være det lidt mere anstrengte $1\lambda^2, 2\lambda^2, 3\lambda^2, 4\lambda^2, 5\lambda^2, 6\lambda^2$ -hexagerminan.

hvilke atomer eller grupper der betragtes som ligander. Typisk vil dette i hvert fald gælde hydrogen.

Det er nørdet, og det giver som regel meget lange navne, men det tilbyder altså letforståelige navne, hvor andre metoder må give op eller fører til særdeles kringledede navne. Vi vil ikke gøre mere ved det her, men læserne kan fornøje sig med eksemplerne i figur 8 og 9.

Som afslutning kan man lige snuppe figur 10, der repeterer tre af de nomenklaturtyper, vi har beskæftiget os med indtil nu.

Ture Damhus (turedamhus@outlook.dk) er formand for Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg og medlem af IUPAC's Division VIII, der udarbejder IUPAC's nomenklaturanbefalinger.

Referencer

1. T. Damhus: Grundstofnavnene i arbejde for kemien. I. Dansk Kemi 100 #3 (2019) 20-22 (del 1); 100 #4 (2019) 26-27 (del 2).
2. T. Damhus: Grundstofnavnene i arbejde for kemien. II. Dansk Kemi 100 #5 (2019) 34-38.
3. "The Red Book 2005", IUPAC Nomenclature of Inorganic Chemistry [N. Connelly, T. Damhus, R.M. Hartshorn. A.T. Hutton (red.); RSC Publishing 2005].
4. "The Blue Book 2013", IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry [H.A. Favre, W.H. Powell (red.); Royal Society of Chemistry 2013]. Check altid rettelseslisten på <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BErrors.html>, som løbende opdateres. Vedrørende H-W se også Pure Appl. Chem. 55 (1983) 409-416 eller <https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/hetero/HW.html>.
5. Kemisk Ordbog [Redigeret af Kemisk Forenings Nomenklaturudvalg. Teknisk Forlag 1996]. Afsnit 1.3.8.3 og ordlisten.
6. T. Damhus: Blegesystemer i vaskemidler. 4 siders indstik i Dansk Kemi 86 (10) 2005.
7. T. Damhus: Fra vaskefiasko til tekstilsucces – en overraskende udvikling med en industriel oxidoreductase, i: Kemi & Klær – Tekstilkemi i historisk perspektiv [T. Damhus, A. Kildebæk Nielsen, C.B. Knudsen (red.), Historisk-kemiske skrifter nr. 20, udgivet af Dansk Selskab for Historisk Kemi 2011 (<https://www.historisk-kemi.dk>)].
8. G. Reinhardt, M. Best, M. Ladwig: MnTACN – A New Catalyst in Automatic Dishwashing Applications, artikel i SOFW Journal (10) 2012. Artiklen synes desværre lidt besværlig at komme i nærheden af for ikke-abonnenter.
9. Produktblad for WeylClean® MnTACN fundet august 2019 på <https://www.weylchem.com/weylclean-mntacn.html>.
10. C.E. Housecroft, A.G. Sharpe: Inorganic Chemistry [5th Ed., Pearson, 2018]. Section 16.10.

Dansk Laborant-Forening

**Kom og hils på din landsforening på DiaLabXpo 2019
24.-26. september i Lokomotivværkstedet, København**

Vi står klar til en snak med dig om hvad der sker på din arbejdsplads, og de udfordringer du møder. Som altid er vi klar til at høre om de ønsker og forventninger du har til din landsforening. Det kan være om efteruddannelse, videreuddannelse, faglige aktiviteter, arbejdsmiljø eller hvad der fylder i dit arbejdsliv.



DL-F/HK

Vel mødt på stand nr. L3028

