

Chlorogensyre, kaffesyre og kanelisyre

– eksempler på nogle generelle problemer med ikke-systematiske kemiske navne

Af Ture Damhus, medredaktør af *Kemisk Ordbog*

To nylige indlæg af Thorvald Pedersen i *Dansk Kemi* [1,2] giver anledning til at fremkomme med nogle generelle bemærkninger om problematikken: systematiske versus ikke-systematiske navne og om karakteren af værket *Kemisk Ordbog* (KO) [3].

En vejledning

Først og fremmest er det vigtigt at pointere, at vi i redaktionen af KO kun er glade for, at der er opmærksomhed omkring emner, der er behandlet deri. Alle bidrag til forbedringer er velkomne, som det er fremhævet i den trykte bogs forord og på værkets nye hjemmeside. KO er nemlig ikke, som mere end antydnet i [1], en ophøjet urørlig lovtekst, som kan lægges til grund for domfældelse over de arme syndere, som forbryder sig mod den rette lære, men derimod et kollektivt projekt iværksat af Kemisk Forening som en hjælp til det danske kemikersamfund. Der tilbydes information af forskellig art og gøres et forsøg på at vejlede i systematisk nomenklatur – til brug for dem, der ønsker det. Vi, der har lagt betydelige ressourcer i arbejdet med bogen, vil være kede af at blive anskuet som en slags yppersteprester, der prædiker en ufejlbarlig lære. Det er slet ikke stilen!

Redaktionen af *Dansk Kemi* efterlyser i forbindelse med [1]

debat om »nomenklatur kontra formidling«. Der skulle helst ikke være noget »kontra« her, men det er rigtigt, at navne som chlorogensyre, kaffesyre og kanelisyre, der ikke indeholder nogen som helst systematik (ud over stavelsen »syre«), kan stille sig hindrende i vejen for klar kommunikation. Systematisk nomenklatur er en god hjælp her, hvis man vel at mærke ved, hvad man vil kommunikere.

Chlorogensyre

Th.P. kommenterer i [2] det systematiske navn givet i KO for chlorogensyre og mener, at der mangler specifikation af konfigurationen omkring dobbeltbindingen. Det sker med henvisning til et link til *American Chemical Society's* hjemmeside, hvor chlorogensyre for nylig var *molecule of the week*. Imidlertid vil man ved faktisk at forfølge det pågældende link nå ind til *Chemical Abstracts Service's* registrering af *chlorogenic acid* under CAS-nummer 327-97-7 og dér kunne konstatere, at der står »Double bond geometry unknown«. Det er rigtigt, at der anføres et antal alternative navne baseret på kaffesyre og kanelisyre (caffeic acid og cinnamic acid) i denne CAS-databasepost, og at navnene kaffesyre og kanelisyre og deres engelske ækvivalenter har været associeret specifikt med *trans*- eller (*E*)-konfi-

Kontinuerlig måling af viskositet

Unikt in-line viskosimeter for alle typer væsker og flydende medier, som f.eks. mayonaise, ketchup, sennep, yoghurt, sirup salatdressing og gelatine.

Viskosimetret måler ved høj frekvens, og giver derfor en nøjagtig og repeterbar måleværdi, der er egnet til processtyring og kontrol.



Sensorstave og transmitter

- Kontinuerlig måling i alle typer pumpbare og flydende medier.
- Kan monteres ganske tæt på rør- eller tankvæg.
- Standard-, sanitære-, højtemperatur-, Ex og specialsensorer til ethvert formål (også laboratorie).
- Transmitter med indgang for proces-temperatur til korrektion af viskositet.

Hans Edvard Teglers Vej 5 | 2920 Charlottenlund
Telefon: +45 39 903 905 | www.contech.dk

CONTECH
INSTRUMENTERING

guration omkring dobbeltbindingen. Imidlertid er der til disse to navne, som de er, heller ikke knyttet en bestemt dobbeltbindingsgeometri i CAS-databasen. IUPAC definerede i 1979 [4] cinnamic acid som *trans*-forbindelsen, og dengang lærte nogle af os også i vores kemistudium, at kaneltsyre var *trans*-forbindelsen, mens *cis*-forbindelsen hed allokaneltsyre; men i 1993, i de nugældende regler for organisk nomenklatur [5], var navnet blevet til stamnavn for forbindelsen *uden* specificeret dobbeltbindingsgeometri.

Hvad så med (*E*)- og (*Z*)-formerne af de tre syrer nævnt ovenfor? De har faktisk også poster i CAS-databasen med deres egne CAS-numre og de samme navne, blot med stereodeskriptorerne tilføjet, hvilket viser, at der er forfattere og redaktører i den kemiske litteratur, der *ikke* opfatter dem som implicite i selve navnene. Men der skal nok være ganske mange tilfælde af, at man har brugt CAS-numrene for de uspecifikke strukturer i tilfælde, hvor der var underforstået (*E*)- eller (*Z*)-. I hvert fald har CAS mange flere referencer på de uspecifikke poster. Som en sidebemærkning kan i øvrigt nævnes, at Carsten Christophersen, i samme nummer af bladet som Th.P.'s sidste indlæg, i forbindelse med en diskussion af kaffe tegner chlorogensyremolekylet med ikke-specificeret geometri ved dobbeltbindingen [6].

CAS-numre

Ved udarbejdelsen af 2. udgave af KO traf vi i redaktionen den temmelig ambitiøse beslutning at ville medtage CAS-numre, hvor det var relevant og muligt uden for lange udredninger. Under opslagsordet »chlorogensyre« i KO specificerer det givne systematiske IUPAC-navn, korrekt afskrevet af Th.P. i [2], strukturen i præcis samme grad som det systematiske CAS-navn under posten »chlorogenic acid« med CAS-nummer 327-97-7, som er det, vi anfører. Vi kunne, som man nu vil forstå, dårligt gøre andet med dette opslagsord, men der kunne eventuelt indføres to yderligere poster for (*E*)- og (*Z*)-chlorogensyre, og dette vil vi nok gøre ved næste opdatering af KO.

For kaneltsyre er der som nævnt ovenfor den interessante situation, at navnet pr. tradition har en mere specifik betydning, end det har i CAS og nu hos IUPAC. Hvad skal man så gøre i KO? Vi har i det tilfælde valgt at oprette to poster: én for kaneltsyre som IUPAC-ankendt navn for 3-phenylpropensyre (= 3-phenylprop-2-ensyre med alle lokanter) uden specificeret dobbeltbindingsgeometri og med CAS-nummer 621-82-9 og én

for (*E*)-forbindelsen med det samme opslagsord »kaneltsyre«, men hvor dette så bliver klassificeret som trivialnavn og tilordnes CAS-nummeret 140-10-3 hørende til denne isomer. Dertil kommer en post med opslagsordet »allokaneltsyre«, der klassificeres som trivialnavn for (*Z*)-kaneltsyre og tilordnes CAS-nummeret 102-94-3 hørende til (*Z*)-isomeren.

For opslagsordet »kaffesyre« kan man med rette kritisere KO's valg. Det specificeres som navn for (*E*)-forbindelsen; det har vi nok syntes (som Th.P.) var det, man normalt forstod ved kaffesyre. Men det anførte CAS-nummer hører til den uspecifikke post hos CAS. Det konsekvente vil være også her at rydde op ved at lave tre poster med hver sit CAS-nummer, og dette vil komme med i næste version af KO.

Det var nok dristigt at vove sig ud i dét med CAS-numrene, for det er, som illustreret ovenfor, ikke altid helt enkelt at tilordne de rigtige numre, navnlig ikke for trivialnavne, der ikke er ophøjet til IUPAC-navne, og hvor ingen autoriteter ud over CAS selv derfor har defineret, hvad de dækker. CAS er baseret på, hvad kemikerne skriver i litteraturen, så hvor der er uklarheder eller inkonsistenser i forbindelse med registrering af kemiske navne, er der en slags kollektivt medansvar. Øget brug af entydige navne i litteraturen, især systematiske navne, kan hjælpe til at modvirke dette og dermed fremme klar kommunikation.

Der er en række andre generelle problemer vedrørende tilordning af CAS-navne og -numre, som også er interessante i sammenhæng med diskussionen om nomenklatur og kommunikation. Nogle af disse håber KO-redaktionen at komme ind på i en senere artikel.

E-mail-adresse
Ture Damhus: tda@novozymes.com

Referencer

1. Th. Pedersen: Kemiske parallelsamfund? *Dansk Kemi* **87** nr. 6/7 (2006) 5.
2. Th. Pedersen: Kemikeren i køkkenet, *Dansk Kemi* **87** nr. 8 (2006) 32-33, specielt boksen »Chlorogensyre igen-igen«.
3. *Kemisk Ordbog*, 2. udgave [T. Damhus, S. Møller, A. Senning, redaktører; Nyt Teknisk Forlag 2005].
4. *IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry* [Pergamon Press, 1979].
5. *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds – Recommendations 1993* [Blackwell Scientific Publications, 1993].
6. C. Christophersen: Tak for kaffe, *Dansk Kemi* **87** nr. 8 (2006) 8-10.

Nomenklatur kontra formidling

Af Marianne Berthelsen, lektor, Tornbjerg Gymnasium

De seneste indlæg i *Dansk Kemi* [1,2,3] om dette emne cementerer den konflikt, der er indbygget i ethvert videnskabssprog – specielt i det kemiske fagsprog. Sprog er en »variabel størrelse«, som farves af tid og sted, de øvrige ord i teksten samt i det talte sprog også af tonefald og gestik. Videnskabssprog er karakteristisk ved, at der i det enkelte videnskabelige mikrosamfund søges efter en fælles definition af fagudtryk [4]. Det gælder alle videnskaber – ikke kun kemi, i kemi er der blot endnu flere sprog end i mange andre videnskaber. Ud over det beskrivende sprog, som findes på både et konkret niveau og

et mere abstrakt niveau, når man går over til beskrivelsen af mikroskopiske forhold, så er der også et formelsprog – faktisk ikke kun ét men to, idet man som kemikere både skal beherske det kemiske formelsprog og det matematiske formelsprog ... blot med andre symboler end de, der oftest anvendes i matematik.

Konflikten ligger desuden i, at langt de fleste ord har flere betydninger. Det kan man nemt overbevise sig om ved at slå tilfældigt op i *Nudansk Ordbog* [5]. Et ord som »forstenet« har både betydningen »at være omdannet til sten« og en overført

betydning, hvor forstenet bruges om en person, der er »stivnet, lammet, paralyseret«. Betydningen kommer altså af brugen – af konteksten.

Det er derfor særdeles forståeligt, hvis elever finder det vanskeligt at kapere disse mange sprog. Det er da også vist af blandt andet Vivi Ringnes [6] og Inge Heise (IH) [7]. IH skriver således i »Hvad sker der i klasseværelset« [7], at kemi helt sikkert er matematikernes latin! Baggrunden er, at der er en række »gloser«, der skal læres (helst udenad, selvom det er et fyord i dagens pædagogiske praksis), og der er en række koder, der skal knækkes. Er det først sket, går det gerne glat med både forståelsen og kommunikationen på fagsproget. I langt de fleste tilfælde når eleverne imidlertid ikke så langt, inden de giver op, og som en naturlig konsekvens vælger de kemien fra allerede tidligt i deres uddannelsesforløb – dvs. i det øjeblik, hvor de selv skal formulere sig på kemisprog og ikke kan nøjes med at se på eller selv udføre spændende, sjove og farverige forsøg. Alt andet lige synes det lettere og interessanter for eleverne at formulere sig på f.eks. biologisprog eller psykologisprog for slet ikke at tale om samfundsfagssprog – end på kemisprog. I netop biologisproget kan eleverne også let overføre en række glosser fra folkeskolen og dagliglivet. Jeg nævner i flæng: ilt, brint, kuldioxid, kulstof, kulhydrat, muskler, hjerte, nyre, celler med mange flere, og her er der ikke konflikt mellem godkendt fagsprog og entydig brug i videnskabelig sammenhæng. Kunsten går blot ud på at tillægge hvert af de allerede kendte ord en række ekstra betydninger.

Når Ture Damhus (TD) anfører i sit indlæg i indeværende nummer [8], at »Øget brug af éntydige navne, ... kan hjælpe til at ... fremme klar kommunikation« er det naturligvis korrekt, og jeg har da også hørt det argument [9], at systematikken skulle være til gavn for eleverne. Imidlertid er de systematiske navne kun til gavn for de, der kender til og har brug for den éntydige information, som disse navne giver. Jeg har læst utallige 3.årsopgaver, hvor ældre kemisk sprogbrug i ældre kemisk eller perspektiverende litteratur eller evt. sagt af en forsker på et universitet pludselig udgjorde en barriere, som fik lange forklaringer med på vejen i en fodnote. Dette naturligvis fordi eleven havde lært systematikken og kunne afkode den, men pludselig så ikke kunne afkode danske hverdagsord og begreber i en kemisk sammenhæng. Kemiundervisning i dag er derfor primært sprogundervisning, hvor der skal kobles mellem elevernes dagligsprog og hverdagsoplevelser og det fagsprog, som er relevant for de kemiske teorier og iagttagelser, der skal beskrives.

Kernen i god formidling er at brænde for sin historie og at målrette den til modtagergruppen og dennes forudsætninger [10]. Man kan ikke dermed konkludere, at god formidling indebærer korrekt brug af videnskabssprogets regler, mens dårlig formidling er formidling, hvor man springer op og falder ned på det stringente videnskabssprog – spørgsmålet er: »Hvem er målgruppen, hvad er målgruppens baggrund og baggrundsviden, og hvad ønsker man at opnå med den aktuelle historie?«

I en af sine altid meget interessante småartikler skriver Carsten Christophersen (CC) f.eks. om kaffe [12], at det indeholder »koffein« og ikke 1,3,7-trimethylpurin-2,6(1*H*,3*H*)-dion [12], til trods for, at han skriver i Dansk Kemi – danske kemikers interne kommunikationsforum. Hvorfor gør CC det? Jeg formoder, at det er fordi, vi alle ved, hvad koffein er, da det er en del af vores dagligsprog, mens kun de udvalgte med et hug ser for sig, hvad 1,3,7-trimethylpurin-2,6(1*H*,3*H*)-dion er. Det skal man være kemisk nomenklatur-skolet for at gøre, og alene af den grund ville CC's målgruppe indsnæv-

res ganske betydeligt ved brug af det systematiske navn for koffein. F.eks. ville jeg undlade at bede mine elever om at læse artiklen, mens jeg, som den er nu, godt kunne finde på, at lade mine højniveauelever prøve kræfter med den. Endelig er koffein meget lettere at sige end det andet. Nøjagtig de samme overvejelser kunne man gøre sig i forbindelse med diskussionen om kaffesyre og chlorogensyre. Disse navne og evt. en model eller en formel er fint for den uskoledede læser, der blot er lidt kemiinteresseret, mens det systematiske navn er skræmmende.

Faktisk er denne målgruppe-problematik fremragende illustreret af CC selv i Dansk kemi nummer 6/7 2006 i formidlingshistorierne om grapefrugt [13], men heller ikke her vælges de systematiske navne for f.eks. (+)-Nootkaton på universitetsniveau, men naturligvis vælges at vise formler af de omtalte stoffer på såvel gymnasieniveau som universitetsniveau – og ikke på lavere niveauer, hvor man ikke kan forvente at nogen »kan læse en kemisk formel«. Den gode formidler vælger altså et abstraktionsniveau og et sprogligt niveau, der kan svare til målgruppen – gennemsnitligt set.

Når der er tale om formidling vil der derfor uvægerligt være tale om »kemiske parallelsamfund«, som Thorvald Pedersen (ThP) skriver i »Kemiske parallelsamfund« [3]. På samme måde vil der som nævnt i eksemplet med elevernes valg af andre fag end netop kemi være tale om, at disse andre naturvidenskabelige fag har en fagtradition, der ikke tilgodeser de nyeste nomenklaturregler inden for kemien, og eleverne undgår sprogkonflikten ved at fravælge det, de finder vanskeligst. I et fag som bioteknologi i gymnasiet, der er ca. 50% kemi og 50% biologi, er det endda således, at man har besluttet, at den kemiske og den biologiske sprogbrug og stavemåde er ligeværdige!

Kemisk Ordbog er en fortræffelig bog, så længe den ikke skal betragtes som en Koran, der kun har den rette fortolkning af ypperstepræsterne. Den og Gads fagleksikon i Kemi [14] er gode håndbøger for vores kemielever på forskellige niveauer. CAS-numrene har vi kun begrænset brug for i formidlings-sammenhæng – det er helt klart kun i mere videnskabelige (og sikkerhedsmæssige) sammenhænge, at disse er relevante. Men skade gør de jo ikke, og det udvider bogens anvendelighed, at de er med.

E-mail-adresse

Marianne Berthelsen: mbe@stofanet.dk

Referencer

1. Dansk Kemi 87 (2006) nr. 4, p 8
2. Dansk Kemi 87 (2006) nr. 4, p 9
3. Dansk Kemi 87 (2006) nr. 6/7, p 5
4. Se f.eks. »Det talte kemisprog«, Undervisningsministeriets Publikationer nr D3, Undervisningsministeriet, Gymnasieafdelingen, 1998, ISBN 87-603-1120-7.
5. Politikens store nye NU DANSK ordbog, Politikens Forlag, 1996. ISBN 87-567-5631-3 (bind 1, 378)
6. i Vivi Ringnes: *Elevers kjemiforståelse og læringsvansker knyttet til kjemibegreper*. Univ. i Oslo 1993.
7. i Inge Heise: *Hvad sker der i klasseværelset?* Gymnasieafdelingen. Skriftserie nr. 10. Undervisningsministeriet.
8. Dansk Kemi 87 (2006) nr. 10, p
9. Samtale med Vivi Gammelgaard Nielsen, Århus Stasgymnasium ved censur af 3.årsopgaver i kemi marts 2002.
10. T. Damhus, S. Møller, A. Senning, (red): *Kemisk Ordbog*, 2. udgave, Nyt Teknisk Forlag, 2005.
11. Bl.a. sagt af Anja Phillip, ved et foredrag i UNF, Odense, november 2004.
12. C. Christophersen: Tak for kaffe, *Dansk Kemi* 87 nr. 8 (2006) 8-10.
13. Dansk Kemi 87 (2006) nr. 6/7, p 6-9.
14. H.C.Helt og E. Rancke-Madsen: *Kemi, Gads fagleksikon*. Gads Forlag, København 1980 og nyere udgaver. ISBN 87-12-23104-5 (Vi har ikke råd til nye bøger på gymnasierne!)